



**FELIPE AUGUSTO FERNANDES**

**MODELO DE VON BERTALANFFY EM DIFERENTES  
APLICAÇÕES**

**LAVRAS – MG**

**2023**

**FELIPE AUGUSTO FERNANDES**

**MODELO DE VON BERTALANFFY EM DIFERENTES APLICAÇÕES**

Tese apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Estatística e Experimentação Agropecuária, para a obtenção do título de Doutor.

Prof. Dr. Tales Jesus Fernandes  
Orientador

**LAVRAS – MG**  
**2023**

**Ficha catalográfica elaborada pelo Sistema de Geração de Ficha Catalográfica da Biblioteca  
Universitária da UFLA, com dados informados pelo(a) próprio(a) autor(a).**

Fernandes, Felipe Augusto.

Modelo de von Bertalanffy em diferentes aplicações / Felipe  
Augusto Fernandes. - 2023.

115 p.

Orientador(a): Tales Jesus Fernandes.

Tese (doutorado) - Universidade Federal de Lavras, 2023.

Bibliografia.

1. Regressão quantílica. 2. Adubação nitrogenada. 3. Método  
transversal. I. Fernandes, Tales Jesus. II. Título.

**FELIPE AUGUSTO FERNANDES**

**MODELO DE VON BERTALANFFY EM DIFERENTES APLICAÇÕES  
VON BERTALANFFY MODEL IN DIFFERENT APPLICATIONS**

Tese apresentada à Universidade Federal de Lavras, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Estatística e Experimentação Agropecuária, para a obtenção do título de Doutor.

APROVADA em 24 de Fevereiro de 2023.

Profa. Dra. Adriele Aparecida Pereira	UNIFAL
Prof. Dr. Alessandro Dal'Col Lúcio	UFSM
Prof. Dr. Joel Augusto Muniz	UFLA
Prof. Dr. Paulo Henrique Sales Guimarães	UFLA

Prof. Dr. Tales Jesus Fernandes  
Orientador

**LAVRAS – MG  
2023**

*À minha amada mãe, dedico.*

## AGRADECIMENTOS

Agradeço a Deus, por me guiar, fortalecer e pela presença constante em minha vida.

A minha mãe, Maria de Fátima Fernandes, pelo apoio incondicional, carinho, compreensão e comprometimento com a minha educação. A você, meu amor e gratidão eternos.

À minha irmã, sobrinha e ao meu padrasto (in memorian), pelo carinho, incentivo e por se orgulharem de mim.

Aos meus familiares, em especial à minha querida tia Cláudia (in memorian), por sempre se preocupar comigo.

Ao professor Dr. Tales Jesus Fernandes, pela orientação deste trabalho, pela paciência, disponibilidade, incentivo e dedicação de sempre. Levarei seu exemplo como profissional para minha vida. Muito obrigado por tudo!

Aos excelentes professores do DES-UFLA, pelas grandes contribuições para a minha formação, em especial aos professores Dr. Joel Muniz, Dr. Marcelo Cirillo e Dr. Daniel Ferreira.

Aos demais funcionários da Universidade Federal de Lavras (UFLA), por nos auxiliar nas diversas atividades.

Aos membros da banca pelas relevantes contribuições para este trabalho, e a professora Dra. Graziela Gouvêa (UFOP) por me incentivar a ingressar na pós-graduação.

À minha querida amiga Kelly Pereira de Lima, sem você, a realização deste doutorado seria mais difícil e chato, obrigado por sempre estar disponível.

Aos meus amigos Henrique Alves, Edilson Silva e Édipo Silva obrigado por toda ajuda e companheirismo nessa jornada.

À Lina pela amizade e por saber que sempre posso contar com você.

Aos colegas de pós-graduação com os quais tive bons momentos durante a fase de estudos. Agradeço pela colaboração, incentivo e apoio, que foram fundamentais para que eu pudesse chegar até aqui, em especial: Ariana, Haiany, Laíla, Neto, Luciano, Jaqueline e Cristian e aos colegas do Grupo de Estudos em Regressão Não Linear (NLIN).

Meu agradecimento a todos os meus amigos pelos conselhos, palavras de apoio, ajudas e risadas, em especial Lilian, Sicelo, Wesley e Mariana.

Aos colegas de trabalho da UFRB, agradeço pela convivência e bons momentos, em especial aos professores Paulo Henrique Silva, João Castelo, Tailan Santos e Carlos Pôncio.

Aos colaboradores dos artigos desenvolvidos durante o doutorado, em especial: Maria Alice Silva, Taylor Lima, Alisson Clemente e Cesar Santos.

O presente trabalho foi realizado com o apoio do Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq);

À UFLA e ao Programa de Pós-Graduação em Estatística e Experimentação Agropecuária, pela oportunidade concedida para realização do curso de doutorado e pelo ensino gratuito e de qualidade. VIVA A EDUCAÇÃO PÚBLICA!

*“Alguém está sentado na sombra hoje porque alguém plantou uma árvore há muito tempo.”*  
*Warren Buffett*

## RESUMO

Na natureza existem vários fenômenos que os pesquisadores têm o interesse de estudar e entender como foi seu desenvolvimento, absorvendo o maior grau de informações possíveis. Nesse contexto, utiliza-se muito a modelagem estatística, sendo a regressão linear ou a não linear as mais utilizadas. Apesar da regressão não linear ser mais complexa devido a questões de estimações de parâmetros, possui a vantagem de ter modelos mais parcimoniosos pois, em geral, possuem menor número de parâmetros, sendo que estes possuem significado prático ou biológico. Neste trabalho foram exploradas diferentes aplicações do modelo não linear de von Bertalanffy, podendo utilizar diferentes coeficientes alométricos ou parametrizações. O modelo de von Bertalanffy inicialmente foi utilizado na descrição do crescimento de peixes e crustáceos, contudo, atualmente este modelo vem sendo utilizado em diversas áreas, de ciências agrárias à biologia. A primeira aplicação proposta neste trabalho foi no estudo da descrição do crescimento de coelhos mestiços utilizando distintas metodologias de coleta dos dados, a longitudinal e a transversal, em que a primeira é uma coleta do peso do mesmo animal ao longo do tempo e a segunda uma coleta da variável em estudo (peso) em um único dia, utilizando animais de mesma raça de idades diferentes. A segunda aplicação foi a utilização do modelo não linear de von Bertalanffy na descrição da volatilização de amônia em fertilizantes nitrogenados convencionais e de eficiência aumentada aplicadas ao cafeeiro. Para a terceira aplicação, utilizou-se técnicas de regressão não linear quantílica e análise de possíveis *outliers* como solução para os desvios de pressupostos dos resíduos do ajuste do modelo de von Bertalanffy para descrição da volatilização de amônia em fertilizantes nitrogenados convencionais e de eficiência aumentada aplicadas ao cafeeiro.

**Palavras-chave:** Adubação nitrogenada. Coelhos mestiços. Fertilizantes. Regressão quantílica não linear.



## ABSTRACT

In nature, there are several phenomena that researchers are interested in studying and understanding how their development was, absorbing the greatest possible degree of information. In this context, statistical modeling is often used, and linear or non-linear regression are the most used. Although non-linear regression is more complex due to parameter estimation issues, it has the advantage of more parsimonious models because, in general, they have a lower number of parameters with practical or biological significance. In this study, different applications of the non-linear von Bertalanffy model were explored, which can use different allometric coefficients or parameterizations. The von Bertalanffy model was initially adopted to describe the growth of fish and crustaceans, however, this model is currently being used in several areas, from agricultural sciences to biology. The first application proposed here was in the description of the growth of crossbred rabbits using different data collection methodologies, longitudinal and cross-sectional, in which the first is a collection of the weight of the same animal over time and the second a collection of the variable under study (weight) in a single day, using animals of the same breed of different ages. The second application was the use of the non-linear von Bertalanffy model in the description of ammonia volatilization in conventional and enhanced efficiency nitrogen fertilizers applied to coffee plants. For the third application, non-linear quantile regression techniques and analysis of possible *outliers* were employed as a solution for deviations from the assumptions of the residuals of the fit of the von Bertalanffy model for the description of ammonia volatilization in conventional and enhanced efficiency nitrogen fertilizers applied to the coffee tree.

**Keywords:** Nitrogen fertilization. Crossbred rabbits. Fertilizers. Non-linear quantile regression.

## LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Etapas para fazer a análise de regressão. . . . .	19
Figura 2.2 – Densidade das distribuições Skew normal, Skew Student-t, Skew Laplace, Skew slash e Skew normal contaminada para $\mu = 0$ , $\sigma = 1$ sob diferentes valores do parâmetro de assimetria $p(\tau)$ . . . . .	38
Figura 3.1 – Daily losses of $NH_3$ -N by volatilization in the 1 <sup>st</sup> , 2 <sup>nd</sup> and 3 <sup>rd</sup> N-splitting, respectively (a, b and c) of conventional and stabilized nitrogen fertilizers and climatic conditions (d) of the 2015/2016 coffee growing season. . . . .	77
Figura 3.2 – Cumulative losses of $N - NH_3$ by volatilization in the 1 <sup>st</sup> split of conventional and stabilized nitrogen fertilizer application in the 2015/2016 coffee growing season. . . . .	80
Figura 3.3 – Cumulative losses of $N - NH_3$ by volatilization in the 2 <sup>nd</sup> split of conventional and stabilized nitrogen fertilizer application in the 2015/2016 coffee growing season. . . . .	81
Figura 3.4 – Cumulative losses of $N - NH_3$ by volatilization in the 3 <sup>rd</sup> split of conventional and stabilized nitrogen fertilizer application in the 2015/2016 coffee growing season. . . . .	81
Figura 3.5 – Representation of estimates of the parameter $a$ (red dots) of the von Bertalanffy model for conventional and stabilized nitrogen fertilizers and climatic conditions of the 2015/2016 coffee growing season. . . . .	82
Figura 3.6 – Daily losses of $N - NH_3$ by volatilization in the first, second and third splits, respectively (a, b and c) of conventional and stabilized nitrogen fertilizers and climatic conditions (d) of the 2015/2016 growing season. . . . .	95
Figura 3.7 – Daily losses of $N - NH_3$ by volatilization in the second split (a) of conventional and stabilized nitrogen fertilizers and climatic conditions (d) of the 2015/2016 harvest. . . . .	95
Figura 3.8 – Cumulative losses of $N - NH_3$ by volatilization in the second split of Prilled Urea in the 2015/2016 harvest. . . . .	98

Figura 3.9 – Cumulative losses of $N - NH_3$ by volatilization in the second split of Urea + Cu + B in the 2015/2016 harvest. . . . .	99
Figura 3.10 – Cumulative losses of $N - NH_3$ by volatilization in the second split of Urea + Anionic Polymer in the 2015/2016 harvest. . . . .	99

## SUMÁRIO

<b>PRIMEIRA PARTE</b> . . . . .	13
<b>1</b> <b>INTRODUÇÃO</b> . . . . .	14
<b>2</b> <b>REFERENCIAL TEÓRICO</b> . . . . .	17
<b>2.1</b> <b>Modelos de regressão</b> . . . . .	17
<b>2.2</b> <b>Modelo de regressão não linear</b> . . . . .	19
<b>2.3</b> <b>Aplicações dos modelos não lineares</b> . . . . .	21
<b>2.4</b> <b>Método transversal e longitudinal</b> . . . . .	23
<b>2.5</b> <b>O Modelo de von Bertalanffy</b> . . . . .	24
<b>2.5.1</b> <b>Derivadas do modelo de von Bertalanffy</b> . . . . .	26
<b>2.5.2</b> <b>Método de Mínimos Quadrados</b> . . . . .	28
<b>2.5.3</b> <b>Métodos iterativos</b> . . . . .	30
<b>2.5.4</b> <b>Análise de resíduos</b> . . . . .	33
<b>2.5.4.1</b> <b>Autocorrelação dos erros do modelo</b> . . . . .	34
<b>2.5.5</b> <b>CrITÉrios utilizados para verificar a qualidade de ajuste para seleÇo de modelos</b> . . . . .	34
<b>2.5.5.1</b> <b>Coeficiente de DeterminaÇo</b> . . . . .	35
<b>2.5.5.2</b> <b>Erro padro da mdia</b> . . . . .	35
<b>2.6</b> <b>Regresso Quantlica</b> . . . . .	35
<b>2.6.1</b> <b>DefiniÇo de quantil</b> . . . . .	36
<b>2.6.2</b> <b>Regresso quantlica no linear</b> . . . . .	37
<b>2.7</b> <b>AplicaÇes das curvas do modelo de von Bertalanffy</b> . . . . .	40
<b>2.7.1</b> <b>Coelhos</b> . . . . .	41
<b>2.7.2</b> <b>Fertilizantes</b> . . . . .	43
<b>3</b> <b>CONSIDERAÇES GERAIS</b> . . . . .	44
<b>REFERNCIAS</b> . . . . .	51
<b>SEGUNDA PARTE</b> . . . . .	57
<b>ARTIGO 1 Cross-sectional and longitudinal method for describing growth curve of rabbits</b> . . . . .	58

<b>ARTIGO 2 Using the von Bertalanffy model to describe ammonia volatilization from conventional and stabilized nitrogen fertilizers in coffee crop system . . . . .</b>	<b>69</b>
<b>ARTIGO 3 Non-linear quantile regression for a scenario of lack of normality of residuals</b>	<b>87</b>
<b>CONSIDERAÇÕES FINAIS . . . . .</b>	<b>106</b>
<b>APÊNDICE . . . . .</b>	<b>107</b>

## **PRIMEIRA PARTE**

## 1 INTRODUÇÃO

O modelo não linear de von Bertalanffy é amplamente utilizado em diversas análises, principalmente quando se busca uma relação funcional de uma variável resposta com uma ou mais variáveis explicativas. Com isso, a utilização deste modelo para o estudo de fenômenos da natureza é adequada, principalmente quando se trata de crescimento, uma vez que estes acontecimentos nem sempre ocorrem de forma linear. Tem-se também a vantagem deste modelo apresentar boa qualidade de ajuste, ou seja, representa de forma adequada inúmeros conjuntos de dados, com uma quantidade pequena de parâmetros (parcimonioso) com interpretações biológicas (FERNANDES et al., 2019; FIGUEIREDO et al., 2023; JANE et al., 2020; OHNISHI et al. 2014).

Conforme von Bertalanffy (1938), “crescimento” é o aumento mensurável de um sistema orgânico, produzido pela assimilação de materiais obtidos a partir de seu ambiente, deixando claro que este fenômeno é extremamente heterogêneo e complexo. O autor afirma também, que o crescimento é amplamente dependente de fatores externos e internos. Desta forma, o modelo de von Bertalanffy, proposto por Ludwig von Bertalanffy em 1957, é um modelo não linear que apresenta o formato sigmoidal não simétrico em relação ao ponto de inflexão. Sendo, inicialmente, utilizado na área ecológica para modelar o crescimento de peixes e crustáceos em função do tempo e tendo origem de uma equação diferencial (BRUNNER; KÜHLEITNER; RENNER-MARTIN, 2021; von BERTALANFFY, 1957).

O modelo de von Bertalanffy é aplicado em estudos que avaliam o processo de crescimento e desenvolvimento animal, medido pelo aumento das medidas morfométricas ao longo do tempo (FERNANDES et al., 2019; FREITAS, 2005; SILVA et al., 2011), nos estudos florestais aplicado na reconstrução do crescimento de árvores (FRÜHAUF et al., 2020), no estudo de crescimento de frutos (LIMA et al., 2019), no desenvolvimento de grãos (LIMA et al., 2014), dentre várias outras aplicações.

Para o modelo de von Bertalanffy, bem como para outros modelos não lineares, a utilização de reparametrizações é comum, uma vez que pesquisadores podem reorganizar os parâmetros de forma que tenham interpretações mais convenientes com a área de estudo em questão. No entanto, algumas reparametrizações confundem os leitores, tornando o uso da regressão não linear mais complicada. Conforme Cordeiro et al. (2009) e Fernandes et al. (2019), o modelo nem sempre

é expresso numa forma paramétrica adequada, que facilite a convergência dos processos iterativos utilizados para obter as estimativas dos seus parâmetros, sendo necessário buscar uma parametrização mais apropriada.

Além da questão das reparametrizações, para o modelo de von Bertalanffy é discutido qual o expoente alométrico para a equação diferencial mais adequado para cada tipo de estudo. A alometria proporciona uma descrição quantitativa da relação entre uma parte e o todo, sendo importante para agregar todas as informações em um único valor. Existem um conjunto de teorias que sugerem o valor  $m = 2/3$  e outras sugerem  $m = 3/4$ , no entanto, não há um consenso (SHI et al., 2014), por isso esta questão deve ser analisada caso a caso (FERNANDES et al., 2019; OHNISHI et al., 2014).

Em geral, a análise das curvas de crescimento é feita utilizando o método longitudinal, o qual acompanha a evolução do mesmo objeto em estudo (que pode ser animal, vegetal e/ou fruto). Entretanto, alguns pesquisadores, inclusive da área da saúde e da olericultura, já utilizam o método transversal, o qual se utiliza objetos semelhantes em tempos diferentes, por exemplo, curvas de crescimento infantil e ensaios destrutivos, respectivamente (CARINI et al., 2020; SPERANDIO et al., 2011).

Esta utilização do método transversal é adequada para possibilitar a modelagem de situações na qual o pesquisador não tem disponível o tempo suficiente para o estudo de crescimento de alguma espécie animal ou vegetal. Apesar de que, a priori, pode-se ter alguns prejuízos na análise, como a perda da autocorrelação (o que pode ser importante em algum tipo de estudo em que o pesquisador queira modelar a dependência dos resíduos), essa metodologia traz ganhos como a rápida coleta dos dados. No entanto, ainda não foi encontrado estudos que mostrem a comparação entre as metodologias utilizando a mesma base de dados.

Existem na literatura alguns trabalhos que já utilizam o método transversal como substituto para o método longitudinal na análise de curvas de crescimento. Neste sentido, comparar a modelagem utilizando o método transversal com o longitudinal é plausível, tratando o método transversal como uma possível alternativa para este tipo de análise, sendo que este é o objetivo do primeiro artigo (FERNANDES et al., 2022).



Utilizou-se o peso de coelhos mestiços ao longo do tempo para a comparação dos métodos transversal e longitudinal. Esta escolha ocorreu devido à cunicultura ser uma atividade com alto potencial de crescimento devido à facilidade em seu manejo, a alta prolificidade, rápido crescimento, apresentar baixo impacto poluidor, por se enquadrar bem em sistemas próprios de agricultura familiar, além de produzir carne de alto valor biológico, podendo ser uma alternativa para mitigar a crescente demanda por carne (FERNANDES et al., 2022; GUPTA et al., 2022).

No segundo artigo, a aplicação do modelo de von Bertalanffy foi a modelagem das perdas de nitrogênio (N) por volatilização de amônia em fertilizantes nitrogenados convencionais e de eficiência aumentada aplicados ao cafeeiro. O café é uma cultura de grande importância econômica para o Brasil, que é o maior produtor do mundo. Sendo que, a estimativa de fechamento da safra cafeeira no país, ano de alta bienalidade, indica uma produção superior à 50 milhões sacas de café beneficiado, 6,7% acima da safra 2021 (CONAB, 2022).

A nutrição nitrogenada merece uma atenção especial, pois o nitrogênio (N) é o nutriente necessário em maior quantidade, para manter a produtividade do cafeeiro, então, determinar seu manejo ideal é de grande importância. Utiliza-se fertilizantes convencionais e de eficiência aumentada buscando a redução da perda de N, uma vez que, essas práticas reduzem os custos de produção e os impactos ambientais negativos (DOMINGHETTI et al., 2016; MARTINEZ et al., 2020).

Para o terceiro artigo, tem-se o objetivo de trazer soluções para os desvios de pressupostos encontrados no segundo artigo, propondo como possíveis ferramentas o estudo de regressão não linear quantílica e análise de possíveis outliers.

O objetivo deste trabalho é explorar estas novas aplicações utilizando o modelo não linear de von Bertalanffy, tanto nas análises de curvas de crescimento utilizando dados coletados de forma longitudinal e transversal. Quanto no estudo de perdas acumuladas de  $N - NH_3$  em fertilizantes nitrogenados convencionais e de eficiência aumentada no cafeeiro, e utilizar a regressão não linear quantílica, como uma alternativa, para quando houver violação do pressuposto de normalidade no vetor de resíduos do modelo ajustado.

## 2 REFERENCIAL TEÓRICO

Nesta seção é apresentada uma revisão de literatura sobre modelos de regressão lineares e não lineares e aplicações.

### 2.1 Modelos de regressão

A análise de regressão é uma das técnicas estatísticas mais usadas, que tem como objetivo modelar a relação entre variáveis por meio de funções matemáticas com a inclusão da parte aleatória. A mesma é uma técnica aplicada em várias áreas, como por exemplo, física, biologia, zootecnia, ciência do solo, economia entre outras (HOFFMANN, 2015).

A palavra “regressão” foi empregada originalmente pelo estatístico inglês Francis Galton no século XIX, que, estudando a estatura das pessoas, elaborou a proposição (posteriormente confirmada) de que filhos de pais muito altos tendem a ser mais baixos do que seus pais, o oposto ocorrendo com os filhos de pais muito baixos (FONSECA, 2003). Daí o nome do termo, pois ele percebeu que existe uma tendência dos dados se deslocarem ou regredirem à média da população (GELMAN; HILL; VEHTARI, 2020).

Como já mencionado, os primeiros estudos foram de Galton, em seguida a teoria da *Regressão* foi desenvolvida por vários autores, dentre eles os mais conhecidos são, Draper e Smith, Gallant, Bowerman e O’Connel, Neter e Wasserman, Seber e Goldberger que estenderam a sua aplicabilidade para inúmeras situações diferenciadas.

Os modelos de regressão são muito conhecidos, de acordo com Draper e Smith (1998), a análise de regressão é uma metodologia estatística para prever os valores de uma ou mais variáveis respostas ou dependentes (V.D.), baseando-se em um conjunto de valores de variáveis preditoras ou independentes (V.I.). Ou seja, o modelo de regressão desenvolve uma relação funcional entre as variáveis respostas e preditoras, assim tem-se:

$$Y_i = f(X_i) = f(X_1, X_2, \dots, X_k) \quad i = 1, 2, \dots, k$$

em que:

$Y_i$  representa a  $k$ -ésima variável dependente ou resposta;

$X_i$  representa a  $k$ -ésima variável independente.

Na prática podem existir erros de mensuração das variáveis independentes e que afetam o valor da variável resposta uma vez que, na estatística, esta relação funcional entre as variáveis não é perfeita. Com isso, existem inúmeros fatores (erros) que o modelo não consegue explicar, os quais são chamados erros aleatórios. Então, admitindo que esse erro seja aditivo, o modelo de regressão pode ser representado por:

$$Y = f(\mathbf{X}, \boldsymbol{\beta}) + \boldsymbol{\varepsilon}$$

em que:

$\mathbf{Y}$  representa o vetor de variáveis dependentes ou variáveis resposta;

$\mathbf{X}$  representa o vetor de variáveis independentes ou variáveis regressoras;

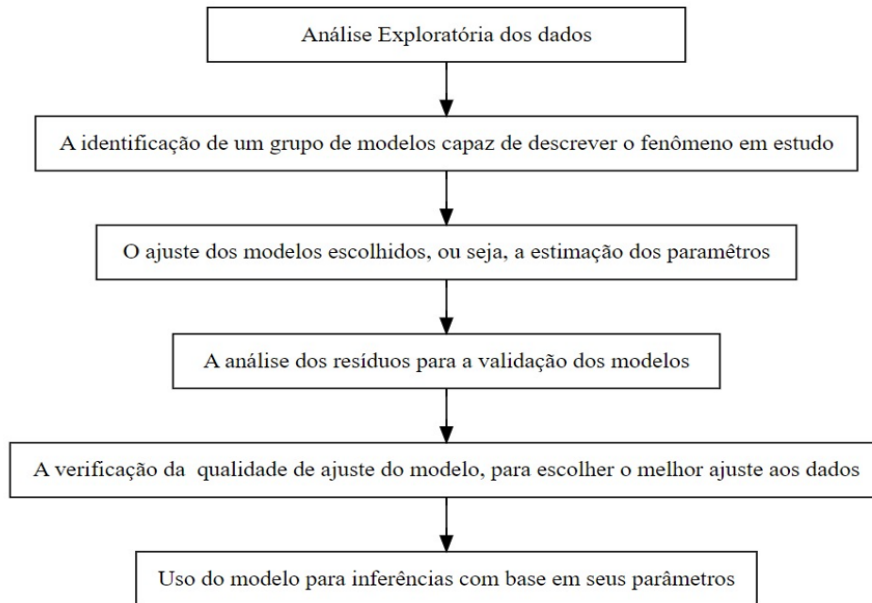
$\boldsymbol{\beta}$  é o vetor de parâmetros que se deseja estimar;

$\boldsymbol{\varepsilon}$  é o vetor de erros aleatórios;  $\boldsymbol{\varepsilon} \sim N(0, \sigma^2)$ .

A análise de regressão tem por objetivo descrever por meio de uma equação a relação existente entre duas ou mais variáveis a partir de “n” observações dessas variáveis (MEDEIROS; BIANCHI, 2009). Desta forma, ela se torna bem útil para mostrar com que “grau” as V.I. explicam as V.D. e para fazer predição dentro do intervalo em estudo.

Para fazer a análise de regressão tem-se que seguir as etapas ilustrada na Figura 2.1.

Figura 2.1 – Etapas para fazer a análise de regressão.



Fonte: Do autor.

De acordo com Draper e Smith (1998), os modelos de regressão são classificados de três formas diferentes em relação aos seus parâmetros:

- modelos lineares: são modelos nos quais todas as derivadas parciais em relação aos seus parâmetros não dependem de nenhum parâmetro;
- modelos não lineares: são modelos nos quais pelo menos uma das derivadas parciais depende de algum parâmetro do modelo não existindo nenhuma transformação que o torne linear;
- modelos linearizáveis: são modelos nos quais pelo menos uma das derivadas parciais depende de algum parâmetro do modelo, no entanto, existe alguma transformação que o torne linear.

Como o interesse deste trabalho é estudar modelo para curvas de crescimento utilizando regressão não linear, a seguir esta classe de modelo é apresentada de forma mais detalhada.

## 2.2 Modelo de regressão não linear

Por resolver boa parte dos problemas encontrados por pesquisadores, a utilização de modelos lineares é ampla. No entanto, nem sempre consegue descrever a relação de alguns fenômenos

naturais. Para isso, a utilização de modelos não lineares torna-se muito útil, mesmo aumentando o grau de complexidade nas análises.

Os modelos não lineares surgem de soluções de sistemas de equações diferenciais, possibilitando obter interpretações práticas ou biológicas sobre o fenômeno. Estas interpretações tem por base as relações entre os parâmetros, os quais podem ter significado prático na descrição do fenômeno em estudo (WEISBERG, 2005).

Mischan e Pinho (2014) definem um modelo matemático não linear com variáveis independentes ( $X_i$ ) de forma que qualquer modelo pode ser escrito genericamente como:

$$Y = f(\mathbf{X}, \boldsymbol{\beta}) \quad (2.1)$$

onde  $f(\mathbf{X}, \boldsymbol{\beta})$  seja não linear com respeito aos parâmetros  $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_p$ , que são os  $p$  elementos do vetor  $\boldsymbol{\beta}$ .

Por exemplo, o modelo

$$Y = \beta_0 + \beta_1^x \cdot \beta_2$$

é um modelo não linear com  $p = 3$  parâmetros, sendo vetor  $\boldsymbol{\beta}$  dado por  $\boldsymbol{\beta}' = [\beta_0 \quad \beta_1 \quad \beta_2]$ .

De acordo com as autoras supracitadas, um modelo estatístico não linear pode ser definido como:

$$Y = f(\mathbf{X}; \boldsymbol{\beta}) + \boldsymbol{\varepsilon} \quad (2.2)$$

em que:

$\boldsymbol{\beta}_{p \times 1}$  é um vetor de  $p$  parâmetros;

$\mathbf{Y}_{k \times 1}$  é o vetor de  $k$  variáveis resposta (ou variável dependente);

$\mathbf{X}_{k \times 1}$  é o vetor de  $k$  variáveis explicativas (ou variável independente);

$f(\cdot)$  é a função a qual se considera existir entre as variáveis, no caso essa relação é não linear nos parâmetros;

$\boldsymbol{\varepsilon}_{k \times 1}$  é o vetor de erro associado ao modelo, de ordem  $k$ .

Existem vários modelos não lineares na literatura, dentre eles, os mais utilizados para aplicação de curvas de crescimento são o Logístico, o Gompertz, o Richards, o Brody e o de von Bertalanffy.

Segundo Fernandes et al. (2015) e Fernandes et al. (2020), o uso de reparametrizações é comum em modelos de regressão não linear de modo que os parâmetros são reorganizados para que tenham interpretações mais convenientes com a área de estudo em questão. Diversos autores utilizaram diferentes parametrizações destes modelos para descrever curvas de crescimento de plantas como no trabalho de Jane et al. (2020), de frutos como no estudo de Lima et al. (2019), Sari et al. (2019) e Diel et al. (2021), de árvores como no artigo de Frühauf et al. (2020) e animal, como nos trabalhos de Cassiano e Sáfadi (2015), Rodrigues et al. (2018) e Fernandes et al. (2020).

Essas diferentes parametrizações podem confundir os pesquisadores, tornando o uso da regressão não linear mais complicada do que realmente é, dificultando assim, o entendimento e as inferências sobre os parâmetros (FERNANDES et al., 2015). Desta forma, deve-se utilizar um modelo na forma paramétrica mais adequada para cada situação, para que seja facilitada a convergência dos processos iterativos utilizados e se obtenha boas estimativas dos seus parâmetros, buscando melhores resultados para o ajuste e interpretação prática para seus parâmetros (CORDEIRO et al., 2009; FERNANDES et al., 2019).

### **2.3 Aplicações dos modelos não lineares**

Vários modelos de regressão não linear estão disponíveis na literatura e são aplicados em diversas áreas para modelar dados de crescimento de frutos, vegetais e animais, bem como para modelar curvas de lactação, secagem, mineralização, dentre outras.

De acordo com Silva et al. (2011), o crescimento dos animais está relacionado diretamente com a quantidade e a qualidade da carne produzida. Com isso, estudos referentes a curvas de crescimento têm aplicação estratégica em: a) programas alimentares; b) auxiliar na definição de critérios de seleção da velocidade de ganho de peso; c) contribuir na definição de sistemas de produção mais eficientes, para cada raça e região; d) contribuir com melhores planos de manejo dos animais; e) programas de melhoramento genético, bem como na definição de cruzamentos.

Fernandes et al. (2019) analisaram o crescimento de mamíferos de corte utilizando o modelo de von Bertalanffy. Neste trabalho é mostrado diferentes parametrizações e coeficientes alométricos do modelo. Os autores também ressaltaram que os parâmetros com interpretação biológica são representados principalmente pelo peso assintótico superior, o qual representa o peso à maturidade, e pela taxa de maturidade, sendo esta uma indicadora da velocidade de crescimento e um parâmetro que representa a abscissa do ponto de inflexão, ou seja, o momento em que o crescimento desacelera.

Mazzini et al. (2005) mostraram que os modelos de regressão não linear, apresentam parâmetros que podem ser interpretados biologicamente, sendo assim, eles se mostram adequados para descrever as curvas de crescimento. Para avaliar a influência de efeitos de ambiente e de grupo genético sobre as curvas de crescimento de vacas de corte, Silva et al. (2011) utilizaram modelos de regressão não linear.

Aplicações destes modelos em crescimento de fruto podem ser vistas em Muianga et al. (2016) e Silva et al. (2020), nos quais, os autores avaliaram o ajuste dos modelos Gompertz e Logístico, aos dados do crescimento em comprimento e largura do fruto do cajueiro, considerando erros independentes e com estrutura autorregressiva e na descrição do crescimento do diâmetro de quatro cultivares da amora-preta (Brazos, Choctaw, Guarani e Tupy), respectivamente.

Um outro trabalho utilizando a técnica supracitada foi o de Gazola et al. (2017), que teve o objetivo de investigar a resposta de germinação de sementes de milho, em função do número de dias após o florescimento feminino, para os híbridos de milho OC 705 e CD 5501, em duas épocas de semeadura.

Um modelo muito utilizado para dados reais é o de von Bertalanffy que de acordo com Cassiano e Sáfyadi (2015), é o que proporcionou a menor soma de quadrados dos resíduos, para estudo do crescimento de animais da raça Hereford. Este modelo também apresentou o melhor ajuste para descrever o crescimento de cordeiros machos da raça Ile de France (FALCÃO et al., 2015). No estudo de López et al. (2018) foram examinadas curvas de crescimento comercial de três genótipos de ovinos em um contexto cooperativo e concluiu-se que, o modelo mais adequado para a criação comercial de cordeiros Merino foi o de von Bertalanffy.

A seguir será apresentado de forma detalhada o modelo não linear de von Bertalanffy, o qual será utilizado na realização deste trabalho.

## **2.4 Método transversal e longitudinal**

Comumente na literatura, a análise das curvas de crescimento por meio de modelos não lineares é realizada utilizando o método longitudinal, cujo o qual acompanha-se, em geral ao longo do tempo, a evolução do mesmo indivíduo em estudo (que pode ser animal, vegetal e/ou fruto). Este método usual é visto em diversos trabalhos como por exemplo Fernandes et al. (2019) e Silva et al. (2020). Dados de crescimento obtidos de medidas realizadas no mesmo indivíduo é passível de conter erros dependentes um do outro, ou seja, autocorrelação (MISCHAN; PINHO, 2014), a qual pode ser modelada.

Outro método que vem sendo cada vez mais utilizado é o transversal, cujo o qual utiliza-se indivíduos semelhantes em tempos diferentes para a construção da curva de crescimento, por exemplo em curvas de crescimento infantil, ensaios destrutivos, curvas de crescimento de animais de grande porte, etc. (CARINI et al., 2020; SPERANDIO et al., 2011, SOUZA et al., 2017).

Esta utilização do método transversal, por pesquisadores, de várias áreas, é adequada para possibilitar a modelagem de situações na qual o pesquisador não tem disponível o tempo suficiente para o estudo de crescimento de alguma espécie animal ou vegetal, ou quando há a necessidade de fazer algum ensaio destrutivo, em que o indivíduo observado deve ou precisa ser descartado. Essa metodologia traz ganhos como por exemplo o ganho de rapidez na coleta dos dados, e a possibilidade de fazer experimentos com diferentes indivíduos, cujos os quais devem ser semelhantes.

Alguns trabalhos que utilizaram o método transversal como substituto para o método longitudinal na análise de curvas de crescimento, são encontrados na literatura. Com isso, estudos comparando estes métodos é de grande importância, uma vez que, cada vez mais tem-se a necessidade de tratar o método transversal como uma possível alternativa para análise de curva de crescimento (FERNANDES et al., 2022). Todavia, foi encontrado na literatura somente o artigo de Fernandes et al. (2022) que mostra a comparação entre estas metodologias, utilizando a mesma base de dados.



## 2.5 O Modelo de von Bertalanffy

Von Bertalanffy (1938) afirma que o crescimento animal é amplamente dependente de fatores externos como nutrição, temperatura, espaço vital, e também de fatores internos como hormônios, mudança de água, idade, entre outros. Neste mesmo artigo, o autor observou que as curvas de crescimento de peso em função do tempo, são em forma de S com o ponto de inflexão a cerca de um terço do peso máximo.

O modelo de von Bertalanffy foi utilizado na área ecológica para modelar o crescimento de peixes e crustáceos em função do tempo. Bertalanffy cita em seu artigo, Putter (1920), o qual delibera que o crescimento animal pode ser considerado um resultado expressado por:

$$\frac{dP}{dt} = aP^m - bP^n \quad (2.3)$$

em que  $P$  representa o peso do animal em função do tempo  $t$ ,  $a$  e  $b$  são constantes de anabolismo e catabolismo, respectivamente e,  $m$  e  $n$  são expoentes que indicam os últimos valores proporcionais a alguma potência do peso corporal  $P$ . Anabolismo é o depósito de nutriente e energia para posterior síntese, e catabolismo pode ser entendido como a deposição de carne e nutrientes para a composição de carcaça, porém cabe salientar que os dois acontecem de forma simultânea no organismo.

Segundo Bertalanffy (1957), se dois corpos são razoavelmente semelhantes em forma, a taxa metabólica é proporcional à  $2/3$  do peso, uma vez que a raiz cúbica do volume ou peso é uma dimensão linear e, portanto, seu quadrado tem a dimensão de uma superfície. O que se tornou muito útil para a descrição do crescimento de peixes e crustáceos. No entanto, o autor afirma que para mamíferos esta taxa metabólica corresponde a aproximadamente  $3/4$  do peso.

A lei do valor alométrico de  $3/4$  para mamíferos (a best-fit b value) citada por von Bertalanffy, foi desenvolvido a partir do artigo de Kleiber (1932) (DARVEAU et al., 2002).

Muitos artigos abordaram o expoente de escala de alometria, que pode ser entendido como o valor ou índice alométrico. Existem argumentos hipotéticos, especialmente para o expoente  $2/3$  (Riisgård, 1998; White e Seymour, 2003; Dodds, 2010) e o expoente  $3/4$  (West et al., 1997, 2001; Darveau et al., 2002) os quais são conhecidos como tópicos controversos.

Um grande número de medições da taxa metabólica basal contra a massa corporal foi re-examinado com base em abordagens indutivas (Dodds et al., 2001; McNab, 2008; Ehnes et al., 2011). A maioria das análises demonstrou que o valor alométrico ou de escala seria aproximadamente dentro de um intervalo de  $2/3$  a  $1$  (OHNISHI, S.; YAMAKAWA, T.; AKAMINE, T., 2014). Assim, considerando o modelo de von Bertalanffy, tem-se várias opções para o valor de  $m$ , o que pode gerar diferentes ajustes para os parâmetros. Neste estudo será considerado o modelo de von Bertalanffy com o valor alométrico de  $m = 3/4$  para o artigo 1, e o valor proposto originalmente de  $m = 2/3$ , para os artigos 2 e 3.

Nos artigos será utilizado o modelo de von Bertalanffy com a seguinte parametrização:

$$y_i = a \left( 1 - \frac{\exp(k \times (b - x_i))}{3} \right)^3 + \varepsilon_i \quad (2.4)$$

No modelo 2.4, sabe-se que para  $i = 1, 2, \dots, n$ ;  $y_i$  é a  $i$ -ésima observação da variável dependente,  $x_i$  é a  $i$ -ésima observação da variável independente;  $a$  é o valor assintótico, ou seja, o valor esperado para o crescimento máximo do objeto em estudo, quando  $x_i \rightarrow \infty$ ;  $b$  está associado a abscissa do ponto de inflexão;  $k$  é um índice de maturidade ou precocidade, está associado ao crescimento, quanto maior for seu valor, menos tempo será necessário para o objeto em estudo atingir o valor assintótico ( $a$ );  $\varepsilon_i$  é o erro aleatório associado à  $i$ -ésima observação o qual pressupõe-se que seja independente e identicamente distribuído seguindo uma distribuição normal de média zero e variância constante, ou seja,  $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$ .

O intervalo de confiança, por exemplo, de 95% para o parâmetro do modelo  $\beta_i$  é calculado da seguinte forma:

$$IC(\beta_i) : b_i \pm t(v; 0.25)S(b_i),$$

onde:  $b_i$  é a estimativa para o parâmetro ( $\beta_i$ );  $S(b_i)$  é o erro padrão da estimativa e  $t(v; 0.25)$  é o quantil superior da distribuição t de Student, considerando  $\alpha = 5\%$  e o grau de liberdade  $v = n - p$ .

Este modelo (2.4) apresenta uma parametrização em que o parâmetro  $b$ , pode ser interpretado como a abscissa do ponto de inflexão, e o valor alométrico atribuído é ( $m = \frac{2}{3}$ ), o qual Bertalanffy utilizou originalmente para descrever o crescimento de peixes e crustáceos. Para a des-

criação do crescimento de coelhos Fernandes et al. (2019) afirma que o coeficiente alométrico mais adequado é ( $m = \frac{3}{4}$ ).

De acordo com Mischan e Pinho (2014), existem pontos de importância prática utilizando as derivadas de modelos não lineares, inclusive o de von Bertalanffy. Por exemplo, com base na primeira derivada do modelo será determinada a taxa de crescimento, que auxilia na identificação das fases de crescimento ao longo do tempo analisado. Esta estimativa máxima para a taxa de crescimento ocorre no ponto de inflexão (PI) da curva do modelo. A seguir serão apresentados os cálculos das derivadas até o quarto grau do modelo de von Bertalanffy.

### 2.5.1 Derivadas do modelo de von Bertalanffy

Segundo Mischan e Pinho (2014), a velocidade é a primeira derivada de  $Y_i'$  em relação a  $x_i$ , o ponto de inflexão é determinado igualando-se a derivada de segunda ordem  $Y_i''$  a zero. Considerando a parametrização abaixo:

$$Y_i = a \left( 1 - \frac{e^{k(b-x_i)}}{3} \right)^3 + \varepsilon_i.$$

Para obter a derivada de primeira ordem foi utilizada a regra da cadeia.

$$Y_i' = 3a \left( 1 - \frac{e^{k(b-x_i)}}{3} \right)^2 \cdot -\frac{e^{k(b-x_i)}}{3} \cdot -k,$$

$$Y_i' = ake^{k(b-x_i)} \cdot \left( 1 - \frac{e^{k(b-x_i)}}{3} \right)^2.$$

Para obter a derivada de segunda ordem foi necessário utilizar a regra do produto.

$$Y_i'' = ake^{k(b-x_i)} \cdot -k \cdot \left( 1 - \frac{e^{k(b-x_i)}}{3} \right)^2 + ake^{k(b-x_i)} \cdot 2 \left( 1 - \frac{e^{k(b-x_i)}}{3} \right) \cdot -\frac{e^{k(b-x_i)}}{3} \cdot -k.$$

Organizando e multiplicando as equações:

$$Y_i'' = -ak^2 e^{k(b-x_i)} \cdot \left(1 - \frac{e^{k(b-x_i)}}{3}\right)^2 + \frac{2ak^2 e^{2k(b-x_i)} \cdot \left(1 - \frac{e^{k(b-x_i)}}{3}\right)}{3}.$$

Por meio da função derivada de terceira ordem após ser igualada a zero, encontra-se pontos extremos de aceleração, os quais podem ser importantes dependendo do interesse da pesquisa. Já a derivada de quarta ordem pode trazer outra informação para o pesquisador que é o ponto de desaceleração assintótica, que pode ser entendido como um ponto de parada do crescimento (MISCHAN; PINHO, 2014). Aplicando a regra do produto e regra da cadeia para obter a derivada de terceira ordem tem-se:

$$Y_i''' = -ak^2 e^{k(b-x_i)} \cdot -k \cdot \left(1 - \frac{e^{k(b-x_i)}}{3}\right)^2 - ak^2 e^{k(b-x_i)} \cdot 2 \left(1 - \frac{e^{k(b-x_i)}}{3}\right) \cdot -\frac{e^{k(b-x_i)}}{3} \cdot -k \\ + \frac{2ak^2 e^{2k(b-x_i)} \cdot -e^{k(b-x_i)} \cdot -k}{3}.$$

Organizando e multiplicando as equações:

$$Y_i''' = ak^3 e^{k(b-x_i)} \cdot \left(1 - \frac{e^{k(b-x_i)}}{3}\right)^2 - 2ak^3 e^{2k(b-x_i)} \cdot \left(1 - \frac{e^{k(b-x_i)}}{3}\right) + \frac{2ak^3 e^{3k(b-x_i)}}{9}.$$

Aplicando a regra do produto e regra da cadeia para obter a derivada de quarta ordem:

$$Y_i'''' = ak^3 e^{k(b-x_i)} \cdot -k \cdot \left(1 - \frac{e^{k(b-x_i)}}{3}\right)^2 + ak^3 e^{k(b-x_i)} \cdot 2 \left(1 - \frac{e^{k(b-x_i)}}{3}\right) \cdot -\frac{e^{k(b-x_i)}}{3} \cdot -k \\ - 2ak^3 e^{2k(b-x_i)} \cdot -2k \cdot \left(1 - \frac{e^{k(b-x_i)}}{3}\right) - 2ak^3 e^{2k(b-x_i)} \cdot -\frac{e^{k(b-x_i)}}{3} \cdot -k \\ + \frac{2ak^3 e^{3k(b-x_i)} \cdot -3k}{9}.$$

Organizando e multiplicando as equações:

$$Y_i'''' = -ak^4 e^{k(b-x_i)} \cdot \left(1 - \frac{e^{k(b-x_i)}}{3}\right)^2 + \frac{2ak^4 e^{2k(b-x_i)} \cdot \left(1 - \frac{e^{k(b-x_i)}}{3}\right)}{3} \\ + 4ak^4 e^{2k(b-x_i)} \cdot \left(1 - \frac{e^{k(b-x_i)}}{3}\right) - \frac{2ak^4 e^{3k(b-x_i)}}{3} - \frac{6ak^4 e^{3k(b-x_i)}}{9},$$

sendo que a última fração da equação pode ser simplificada por:

$$-\frac{6ak^4 e^{3k(b-x_i)}}{9} = \frac{-2ak^4 e^{3k(b-x_i)}}{3}.$$

Logo, as duas últimas equações de  $Y_i''''$  podem ser somadas. Calculando o mínimo múltiplo comum chega-se ao resultado final da quarta derivada:

$$Y_i'''' = -ak^4 e^{k(b-x_i)} \cdot \left(1 - \frac{e^{k(b-x_i)}}{3}\right)^2 + \frac{14ak^4 e^{2k(b-x_i)} \cdot \left(1 - \frac{e^{k(b-x_i)}}{3}\right)}{3} \\ - \frac{4ak^4 e^{3k(b-x_i)}}{3}.$$

### 2.5.2 Método de Mínimos Quadrados

Na literatura são encontrados alguns métodos para a estimação de parâmetros, de modelos lineares e não lineares, dentre eles, tem-se o método da máxima verossimilhança, dos momentos e o de mínimos quadrados. No entanto, o mais utilizado, de acordo com Calbo et al. (1989), é o de mínimos quadrados. Segundo Gallant (1987), os estimadores de mínimos quadrados para os modelos de regressão linear não são enviesados, são normalmente distribuídos e têm variância mínima entre a classe dos estimadores não viesados, o que funciona também para os modelos não lineares quando o tamanho da amostra tender para o infinito (assintoticamente).

Os modelos lineares ou os lineares por anamorfose são ajustados aos dados por meio do processo comum de mínimos quadrados de regressão linear. Para o ajuste dos modelos não lineares, o processo continua sendo o dos mínimos quadrados, mas os cálculos são mais complexos (MISCHAN; PINHO, 2014).

Fernandes (2012), ilustra o método de mínimos quadrados considerando a equação de regressão não linear como definido em 2.2 e traz a seguinte notação matricial:

$$\mathbf{Y} = F(\mathbf{X}, \boldsymbol{\beta}) + \boldsymbol{\varepsilon} \quad (2.5)$$

onde:

$$\mathbf{Y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}, F(\mathbf{X}, \boldsymbol{\beta}) = \begin{bmatrix} F(x_1, \beta_1) \\ F(x_2, \beta_2) \\ \vdots \\ F(x_n, \beta_n) \end{bmatrix}, \boldsymbol{\varepsilon} = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 \\ \varepsilon_2 \\ \vdots \\ \varepsilon_n \end{bmatrix}$$

Como temos que  $E[\mathbf{Y}] = E[F(\mathbf{X}, \boldsymbol{\beta}) + \boldsymbol{\varepsilon}] = E[F(\mathbf{X}, \boldsymbol{\beta})] + E[\boldsymbol{\varepsilon}] = E[F(\mathbf{X}, \boldsymbol{\beta})] = F(\mathbf{X}, \boldsymbol{\beta})$ , e  $E[\boldsymbol{\varepsilon}] = 0$ , o resíduo é dado pela diferença entre o valor real e o valor esperado:

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \mathbf{Y} - F(\mathbf{X}, \boldsymbol{\beta}) \quad (2.6)$$

O estimador para o vetor de parâmetros  $\boldsymbol{\beta}$  é dado pelo vetor  $\hat{\boldsymbol{\beta}}$  que minimiza a soma de quadrados de resíduos

$$S(\boldsymbol{\beta}) = \boldsymbol{\varepsilon}'\boldsymbol{\varepsilon} = [\mathbf{Y} - F(\mathbf{X}, \boldsymbol{\beta})]'[\mathbf{Y} - F(\mathbf{X}, \boldsymbol{\beta})] = \mathbf{Y}'\mathbf{Y} - 2\mathbf{Y}'F(\mathbf{X}, \boldsymbol{\beta}) + F(\mathbf{X}, \boldsymbol{\beta})'F(\mathbf{X}, \boldsymbol{\beta}) \quad (2.7)$$

Assim, tem-se a forma quadrática, obtendo-se o ponto de mínimo derivando-se  $S(\boldsymbol{\beta})$  em relação a  $\boldsymbol{\beta}$  e igualando a zero, desta forma temos:

$$\frac{\partial S(\boldsymbol{\beta})}{\partial(\boldsymbol{\beta})} = -2\mathbf{Y}' \times \frac{\partial F(\boldsymbol{\beta})}{\partial(\boldsymbol{\beta})} + \frac{\partial F'(\boldsymbol{\beta})}{\partial(\boldsymbol{\beta})} \times F(\boldsymbol{\beta}) + F'(\boldsymbol{\beta}) \times \frac{\partial F(\boldsymbol{\beta})}{\partial(\boldsymbol{\beta})}$$

$$\frac{\partial S(\boldsymbol{\beta})}{\partial(\boldsymbol{\beta})} = -2[\mathbf{Y} - F(\hat{\boldsymbol{\beta}})]'F(\hat{\boldsymbol{\beta}})$$

Tem-se que  $\frac{\partial F(\boldsymbol{\beta})}{\partial(\boldsymbol{\beta})}$  é a matriz jacobiana e é dada por:

$$\frac{\partial F(\mathbf{X}, \boldsymbol{\beta})}{\partial(\boldsymbol{\beta})} = \begin{bmatrix} \frac{\partial f(x_1, \boldsymbol{\beta})}{\partial(\beta_1)} & \frac{\partial f(x_1, \boldsymbol{\beta})}{\partial(\beta_2)} & \cdots & \frac{\partial f(x_1, \boldsymbol{\beta})}{\partial(\beta_p)} \\ \frac{\partial f(x_2, \boldsymbol{\beta})}{\partial(\beta_1)} & \frac{\partial f(x_2, \boldsymbol{\beta})}{\partial(\beta_2)} & \cdots & \frac{\partial f(x_2, \boldsymbol{\beta})}{\partial(\beta_p)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f(x_n, \boldsymbol{\beta})}{\partial(\beta_1)} & \frac{\partial f(x_n, \boldsymbol{\beta})}{\partial(\beta_2)} & \cdots & \frac{\partial f(x_n, \boldsymbol{\beta})}{\partial(\beta_p)} \end{bmatrix}$$

Com isso resulta-se que:

$$-2\mathbf{Y}' \frac{\partial F(\mathbf{X}, \boldsymbol{\beta})}{\partial(\boldsymbol{\beta})} + 2F'(\hat{\boldsymbol{\beta}}) \frac{\partial F(\mathbf{X}, \boldsymbol{\beta})}{\partial(\boldsymbol{\beta})} = 0$$

Denotando a matriz jacobiana por X, e aplicando a propriedade de matrizes  $(A'B)' = B'A$ , temos:

$$\mathbf{X}'F(\mathbf{X}, \hat{\boldsymbol{\beta}}) = \mathbf{X}'\mathbf{Y} \quad (SEN) \quad (2.8)$$

Este é o sistema de equações normais (SEN) para o modelo não linear. Como no SEN não linear não é possível isolar totalmente o vetor de parâmetros  $\boldsymbol{\beta}$ , é necessário utilizar algum método iterativo, de escolha do pesquisador, para encontrar as estimativas dos parâmetros. Os métodos mais utilizados são o de Gauss-Newton ou método de linearização, o método Steepest-Descent ou método gradiente e o método de Marquardt.

Como as estimativas dos parâmetros, para modelos não lineares, são obtidas por meio de métodos iterativos, as características apresentadas pelos estimadores de mínimos quadrados valem somente assintoticamente (MAZUCHELI; ACHCAR, 2002).

### 2.5.3 Métodos iterativos

Um algoritmo é um procedimento iterativo que a partir de um ponto inicial  $x_0$ , calcula, conforme determinadas regras, um novo ponto  $x_1$ . A partir de  $x_1$  pelas mesmas regras, um ponto  $x_2$ , e assim por diante. Os algoritmos existentes diferem entre si justamente nessas determinadas regras que determinam o ponto seguinte. Para modelos não lineares, os algoritmos normalmente não atingem uma solução exata, mas geram uma sequência de pontos cujo limite converge ao ponto ótimo (FRITZSCHE, 1978).

A ideia dos métodos iterativos consiste em partir de um valor inicial para os parâmetros, ir melhorando-o até que ocorra a convergência para o valor real. Atribui-se um valor inicial para o vetor de parâmetros  $\boldsymbol{\beta}^0$ , então o método estima a distância deste valor para o valor real  $\boldsymbol{\beta}$ , fazendo  $\boldsymbol{\theta}^0 = \boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}^0$ . Desta forma, o próximo passo será  $\boldsymbol{\beta}^1 = \boldsymbol{\beta}^0 + \boldsymbol{\theta}^0$ , e assim sucessivamente.

Esses métodos consistem em fazer aproximações lineares para a função  $f(\mathbf{x}, \boldsymbol{\beta})$  a cada passo, até um critério de parada, preestabelecido, seja atingido. Como são encontrados na literatura vários métodos, Bates e Watts (1988) os diferenciam pela forma como  $\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}^0$  é calculado. Lima (2016) apresenta um exemplo dos critérios básicos:

- a) Gauss-Newton:  $\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}^0 = (\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\boldsymbol{\varepsilon}$ ;
- b) Newton:  $\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}^0 = G^{-1}\mathbf{X}'\boldsymbol{\varepsilon}$ , em que  $G$  é a matriz gradiente;
- c) Gradiente:  $\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}^0 = \mathbf{X}'\boldsymbol{\varepsilon}$ ;
- d) Maquardt:  $\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}^0 = [\mathbf{X}'\mathbf{X} + \delta(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}\mathbf{X}'\boldsymbol{\varepsilon}]$ , em que  $(\mathbf{X}'\mathbf{X})^{-1}$  é inversa generalizada.

O algoritmo de Gauss-Newton, que é o método mais utilizado, usa a expansão da série de Taylor de primeira ordem. Vale ressaltar que mesmo com o critério de parada preestabelecido não é garantida a convergência. Para que este método convirja e esta convergência não leve à mínimos locais, é necessário um vetor de estimativas iniciais, para aproximar o modelo não linear de um linear, caso contrário, a convergência não é garantida. Estudos anteriores e a experiência do pesquisador podem ajudar na obtenção de bons valores para a primeira iteração.

Diferentemente do Método de Newton, o Algoritmo de Gauss-Newton apenas pode ser usado para minimizar uma soma dos valores quadrados da função, mas tem a vantagem de que as derivadas segundas, que podem ser difíceis de calcular, não são necessárias. Na prática, termina-se o processo quando o ponto está suficientemente perto do ponto da solução.

Inicialmente, como na maior parte dos processos iterativos, deve-se atribuir valores iniciais para o vetor de parâmetros, que pode ser definido como  $\boldsymbol{\beta}^0 = [\beta_1^0, \beta_2^0, \dots, \beta_n^0]$ , em que  $n$  é o número de parâmetros do modelo.

Após atribuídos os valores iniciais, o método consiste em desenvolver a série de Taylor até o termo de primeira ordem da função  $F(\mathbf{X}, \boldsymbol{\beta})$ , em torno do valor inicial  $\boldsymbol{\beta}^0$ , com isso tem-se:

$$F(\mathbf{X}, \boldsymbol{\beta}) = F(\mathbf{X}, \boldsymbol{\beta}^0) + \mathbf{J}^0(\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}^0)$$



em que  $\mathbf{J}^0 = \frac{\partial f(\boldsymbol{\beta}^0)}{\partial(\boldsymbol{\beta})}$  é o jacobiano da função no ponto  $\boldsymbol{\beta}^0$ , ou seja, é a matriz de derivadas parciais avaliada no ponto  $\boldsymbol{\beta}^0$ . O jacobiano de um modelo não linear tem um parâmetro em pelo menos uma de suas entradas, ao passo que  $\mathbf{J}^0$  é uma matriz de dimensão  $n_x p$ .

Portanto, substituindo  $F(\boldsymbol{\beta}) = F(\boldsymbol{\beta}^0) + \mathbf{J}^0(\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}^0)$  no modelo não linear, tem-se:

$$\mathbf{Y} = F(\boldsymbol{\beta}) + \boldsymbol{\varepsilon}$$

$$\mathbf{Y} = F(\boldsymbol{\beta}^0) + \mathbf{J}^0(\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}^0) + \boldsymbol{\varepsilon}$$

$$\mathbf{Y} - F(\boldsymbol{\beta}^0) = \mathbf{J}^0(\boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}^0) + \boldsymbol{\varepsilon}.$$

Sabemos que  $F(\boldsymbol{\beta}^0)$  tem ordem  $n \times 1$ , pois cada entrada desta matriz é a respectiva variável independente aplicada ao modelo com os parâmetros  $\boldsymbol{\beta}^0$ . Denotando  $\mathbf{Y}^0 = \mathbf{Y} - F(\boldsymbol{\beta}^0)$  e  $\boldsymbol{\theta}^0 = \boldsymbol{\beta} - \boldsymbol{\beta}^0$ , o modelo pode ser reescrito da seguinte forma:

$$\mathbf{Y}^0 = \mathbf{J}^0 \boldsymbol{\theta}^0 + \boldsymbol{\varepsilon}.$$

E assim, obtém-se uma aproximação de um modelo não linear à um linear. Com isso, seguindo Draper e Smith (1998), os coeficientes de  $\boldsymbol{\theta}^0$  podem ser estimados pelo sistema de equações normais de uma regressão linear da seguinte forma:

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}^0 = (\mathbf{J}^{0T} \mathbf{J}^0)^{-1} \mathbf{J}^{0T} \mathbf{Y}.$$

Após a primeira iteração, corrige-se o vetor de estimativas da seguinte maneira:  $\boldsymbol{\beta}^1 = \boldsymbol{\beta}^0 + \hat{\boldsymbol{\theta}}^0$ . Se a soma de quadrados dos resíduos de  $\boldsymbol{\beta}^1$ , for menor que soma de quadrados dos resíduos de  $\boldsymbol{\beta}^0$ , implica que  $\boldsymbol{\beta}^1$  está mais próximo do verdadeiro valor de  $\boldsymbol{\beta}$ . Este vetor de novas estimativas  $\boldsymbol{\beta}^1$  é utilizado, novamente, como estimativa inicial e se repete o processo. Assim, quando  $\hat{\boldsymbol{\theta}}_n \rightarrow 0$ , a medida que  $n$  cresce, então, conclui-se que algoritmo de Gauss-Newton está na direção correta.

O algoritmo é repetido até que algum critério de parada seja atendido. Dentre os critérios possíveis, pode estar incluso, a diferença entre  $\boldsymbol{\beta}^n$  e  $\boldsymbol{\beta}^{n-1}$ , em que  $n$  representa a  $n$ -ésima iteração ou significância entre as somas de quadrados residuais de  $\boldsymbol{\beta}$  e  $\boldsymbol{\beta}^{n-1}$  e ou número de iterações.

### 2.5.4 Análise de resíduos

Após o ajuste de um modelo não linear é muito importante fazer a análise de resíduos, uma vez que a mesma verifica a adequabilidade do modelo. Na literatura existem algumas formas de se fazer esta análise, entre elas as análises gráficas e os testes de hipóteses.

Uma das principais técnicas utilizadas para analisar visualmente resíduos são os gráficos, como: Gráfico de probabilidade normal dos resíduos; Gráfico dos resíduos versus valores de  $\hat{Y}$ ; Gráfico dos resíduos versus valores de  $X$  (incluída no modelo); Gráfico dos resíduos versus outras  $Xs$  (não incluídas no modelo); Gráfico dos resíduos versus tempo ou ordem de coleta dos dados.

Muitos estudos que possuem modelos de regressão não linear envolvem testes de hipóteses para fazer a análise de resíduo. Dentre os vários testes que são utilizados temos os testes de Shapiro-Wilk, Breusch-Pagan e Durbin-Watson para verificar os pressupostos de normalidade, homocedasticidade e independência, respectivamente.

A seguir será mostrado as hipóteses dos testes supracitados.

Para analisar a normalidade do vetor de resíduos pelo o teste de Shapiro-Wilk, tem-se as seguintes hipóteses:

$H_0$  : Os resíduos apresentam distribuição normal;

$H_1$  : Os resíduos não apresentam distribuição normal.

A função no software R (R Core Team, 2019) para este teste é *shapiro.test*, em que, se o valor-p for maior que o nível de significância  $\alpha$  não rejeita-se  $H_0$ .

Para o teste de Durbin-Watson, as hipóteses testadas são:

$H_0$  : Os resíduos são independentes;

$H_1$  : Os resíduos apresentam autocorrelação.

A função no software R (R Core Team, 2019) é *durbinWatsonTest*, em que, se o valor-p for maior que o nível de significância  $\alpha$  não rejeita-se  $H_0$ .

Por fim, o teste de Breusch-Pagan, em que as hipóteses utilizadas são:

$H_0$  : Existe homogeneidade nas variâncias residuais;

$H_1$  : Não existe homogeneidade nas variâncias residuais.

A função no software R (R Core Team, 2019) é *bptest*, em que, se o valor-p for maior que o nível de significância  $\alpha$  não rejeita-se  $H_0$ .

### 2.5.4.1 Autocorrelação dos erros do modelo

Segundo Seber e Wild (1989) e Mischan e Pinho (2014), dados de crescimento obtidos de medidas feitas no mesmo indivíduo podem seguir um modelo com erros dependentes um do outro, ou seja, é comum que os resíduos também apresentem autocorrelação. Como já mencionado, isso viola o pressuposto de independência do modelo. De acordo com Morettin e Toloí (2006), os resíduos são ditos auto-correlacionados quando há uma variação sistemática dos valores em observações sucessivas.

No caso de estudos de modelos não lineares segundo Prado et al. (2013) e Fernandes et al. (2022), é razoável incorporar a autocorrelação. Assumindo que os resíduos são auto-correlacionados na forma de um processo estacionário auto-regressivo de ordem  $p$ , representado por  $AR(p)$ , então  $\varepsilon_i = \phi_1 \varepsilon_{i-1} + \phi_2 \varepsilon_{i-2} + \dots + \phi_p \varepsilon_{i-p} + u_i$ , em que  $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_p$  são parâmetros de autocorrelação e  $u_i \sim N(0, \sigma^2)$  é um ruído branco. Quando há autocorrelação residual de primeira ordem  $AR(1)$ , os erros do modelo pode ser representados como  $\varepsilon_i = \phi_1 \varepsilon_{i-1} + u_i$ .

A verificação da hipótese de independência após a inclusão do  $AR(p)$  pode feita por meio de análise gráfica, por meio da função de autocorrelação parcial dos resíduos.

### 2.5.5 Critérios utilizados para verificar a qualidade de ajuste para seleção de modelos

Após obter as estimativas para os parâmetros do modelo, torna-se necessário utilizar critérios para escolher os melhores ajustes ou aqueles que descrevem os dados do pesquisador de forma satisfatória. Burnham e Anderson (2004) ressaltaram a importância de teorias científicas para a seleção de modelos, sendo que para isso existem diversas metodologias/critérios.

Motulsky e Christopoulos (2004) afirmam que, rejeita-se qualquer modelo se os melhores valores de ajuste não fizerem sentido ou se os intervalos de confiança são muito amplos, não sendo necessário qualquer teste estatístico para dizer que você não deve aceitar tal modelo. A seguir serão apresentados os critérios para avaliar qualidade de ajuste que serão utilizados neste trabalho.

### 2.5.5.1 Coeficiente de Determinação

O coeficiente de determinação ( $R^2$ ) é um indicador de quanto o modelo foi capaz de explicar os dados em estudo. O  $R^2$  varia entre 0 e 1, indicando, em percentagem, o quanto o modelo consegue explicar os valores observados, quanto mais próximo do 1, melhor é o modelo. O coeficiente de determinação é dado por:

$$R^2 = 1 - \frac{SQR}{SQT}$$

em que:

$SQR$  é a soma de quadrados dos resíduos;

$SQT$  é soma de quadrados total.

### 2.5.5.2 Erro padrão da média

O erro padrão da média é um valor que representa o quanto a média da amostra se aproxima da média da população e é definido por:

$$EPM = \left( \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \right)$$

em que:  $n$  é o tamanho da amostra e  $\sigma$  é o desvio padrão populacional. Tem-se que, quanto menor o erro padrão da média mais adequado é o modelo.

## 2.6 Regressão Quantílica

A regressão quantílica, segundo Koenker e Bassett (1978), é uma extensão natural do modelo de regressão linear clássico, sendo um método estatístico que estima a relação entre variáveis em todas as porções ocorrentes da base amostral, os quantis, sendo uma alternativa aos métodos de regressão tradicionais, como o método de mínimos quadrados (MQ). Como qualquer quantil pode ser utilizado, é possível modelar qualquer posição da distribuição, tais como a cauda inferior ou superior, posições estas que são de interesse em várias áreas do conhecimento e não podem ser ajustadas através de uma regressão baseada em médias. Desta forma, segundo Puiatti et al.

(2020), tem-se modelos mais robustos em relação à presença de outliers e também aos erros com distribuição não normal, sendo possível incorporar uma possível heterocedasticidade.

### 2.6.1 Definição de quantil

O quantil de ordem  $\tau$ , com  $0 < \tau < 1$ , é o valor  $Q_\tau$  que divide um conjunto de dados ordenados  $[X_{(1)}, X_{(2)}, \dots, X_{(n)}]$  de maneira que,  $100\tau\%$  dos seus elementos são inferiores a esse valor e o restante  $[100(1 - \tau)\%]$ , são superiores a ele.

Os quantis mais utilizados são: o quantil de ordem 0,25 comumente chamado de primeiro quartil; o quantil de ordem 0,50 que é a mediana dos valores ordenados e o quantil de ordem 0,75 também chamado de terceiro quartil, estas medidas são visualizadas graficamente por meio do gráfico de caixas (*boxplot*). Também são comuns na literatura os quantis que dividem a distribuição em dez partes iguais: os decis, e os quantis que dividem a distribuição em cem partes iguais: os percentis.

De acordo com HYNDMAN & FAN (1996), o  $\tau$ -ésimo quantil da distribuição de uma variável aleatória  $Y$  é um local particular dessa distribuição, definido como:

$$\tau = F_Y(y) = P(Y \leq y)$$

sendo,  $\tau \in (0, 1)$  e  $F_Y$  a função de distribuição acumulada de  $Y$ .

O quantil de ordem  $\tau$  de uma distribuição é definido como:

$$Q(\tau)(y) = F^{-1}(\tau) = \inf\{y : F_Y(y) \geq \tau\}, \quad 0 < \tau < 1$$

onde  $F^{-1}(\tau)$  é a função inversa de distribuição acumulada no ponto  $\tau$ , e  $\inf\{A\}$  denota o valor ínfimo do conjunto numérico  $A$ . Os quantis da amostra fornecem estimadores não paramétricos de suas contrapartes populacionais com base em um conjunto de observações independentes  $\{X_1, \dots, X_n\}$  da distribuição  $F$ . Seja  $\{X_{(1)}, \dots, X_{(n)}\}$  as estatísticas de ordem de  $\{X_i, \dots, X_n\}$ ,  $Q_i(\tau)$  denota o  $i$ -ésima quantil da amostra (HYNDMAN; FAN, 1996).

Os quantis oferecem uma maneira conveniente de resumir distribuições de probabilidade univariadas, sendo fortemente influenciados pelo comportamento da cauda da distribuição, os quan-

tis são inerentemente locais e são quase impermeáveis a pequenas perturbações da massa distributiva. Podemos mover a massa acima e abaixo da mediana sem perturbá-la, desde que, é claro, a massa não seja transferida de cima para baixo da mediana ou vice-versa. Essa localização dos quantis é altamente vantajosa pelas mesmas razões que as funções de base com suporte local são vantajosas na regressão não paramétrica: porque garante uma forma de robustez que falta em muitos procedimentos estatísticos convencionais, notadamente aqueles baseados na minimização de somas de resíduos quadrados (KOENKER, 2017).

### 2.6.2 Regressão quantílica não linear

Com o passar dos anos, houve uma grande evolução da teoria da regressão quantílica em relação à sua proposta original, sendo estendida também para a classe dos modelos não lineares por Koenker e Park (1996). Tem-se que, o comportamento assintótico dos estimadores dos modelos de regressão quantílica não linear se parece com à teoria dos mínimos quadrados não lineares, de forma que a inferência para regressão quantílica não linear pode ser adaptada diretamente dos métodos destes (KOENKER, 2005).

O modelo de regressão quantílica não linear pode ser escrito como

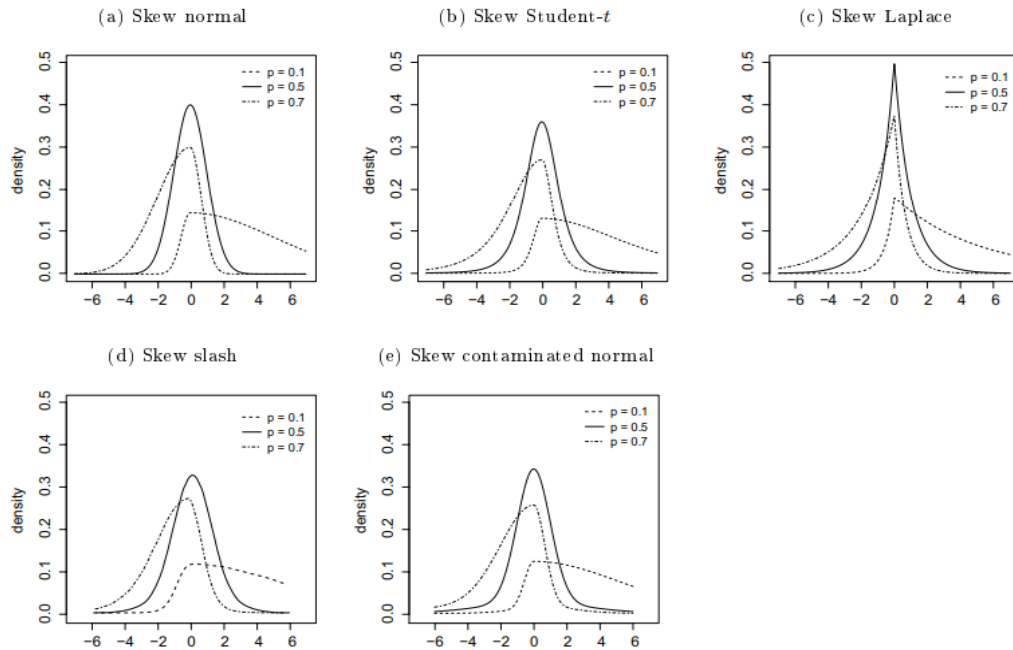
$$\mathbf{Y} = f(\mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}(\tau)) + \boldsymbol{\varepsilon}(\tau)$$

sendo,  $\mathbf{Y}$  o vetor da variável resposta;  $\mathbf{X}$  a matriz de uma ou mais variáveis independentes;  $\boldsymbol{\theta}(\tau)$  o vetor de parâmetros no  $\tau$ -ésimo quantil de  $\mathbf{Y}$ ,  $f(\cdot)$  a forma funcional que expressa a relação não linear entre as variáveis e  $\boldsymbol{\varepsilon}(\tau)$  o vetor de erros independentes e identicamente distribuídos com função densidade de probabilidade  $f_{\tau}(\cdot)$  e quantil de ordem  $\tau$  igual a zero, isto é  $\int_{-\infty}^0 f_{\tau}(\varepsilon_i) d\varepsilon_i = \tau$  (MORALES et al., 2017).

O vetor de resíduos do modelo ajustado deve está associado a uma distribuição de probabilidade que satisfaça suas características. Na literatura, vários trabalhos sugerem o uso da distribuição Laplace assimétrica (GALARZA et al., 2020; KOENKER, 2005). Contudo, Morales et al. (2017) propuseram outras distribuições assimétricas para serem utilizadas na regressão quantílica, as quais,

os autores classificam como distribuições da família *skew* ou família SKD, a Figura 2.2 mostra as densidade de probabilidade das distribuições propostas.

Figura 2.2 – Densidade das distribuições Skew normal, Skew Student-t, Skew Laplace, Skew slash e Skew normal contaminada para  $\mu = 0$ ,  $\sigma = 1$  sob diferentes valores do parâmetro de assimetria  $p(\tau)$ .



Fonte: Morales et al. (2017).

Para a estimação dos parâmetros utiliza-se a função quantil condicional  $[Q_\tau(\mathbf{Y}|\mathbf{X})]$  a qual possui parâmetros não conhecidos  $(\boldsymbol{\theta}_\tau)$  e que são estimados por  $(\hat{\boldsymbol{\theta}}_\tau)$ . De acordo com Koenker (2005), a estimação é realizada minimizando-se a soma ponderada dos resíduos absolutos

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_\tau = \underset{\boldsymbol{\theta}}{\operatorname{argmin}} \sum_{i=1}^n \rho_\tau(\varepsilon_i),$$

em que  $\varepsilon_i = y_i - f(x_i, \boldsymbol{\theta})$  e  $\rho_\tau$  é a função “check” definida como  $\rho_\tau(\varepsilon_i) = \varepsilon_i(\tau - I(\varepsilon_i < 0))$ , sendo  $I$  uma função indicadora, tem-se que a função “check” pode ser escrita como:

$$\rho_\tau(\varepsilon_i) = \begin{cases} \tau \cdot \varepsilon_i, & \text{se } \varepsilon_i \geq 0 \\ (\tau - 1)\varepsilon_i, & \text{se } \varepsilon_i < 0 \end{cases}$$

Tem-se que a função  $\rho_\tau$  multiplica os resíduos  $\varepsilon_i$  por  $\tau$ , se eles forem positivos ou zero e por  $\tau - 1$ , caso forem negativos, desta forma essa função faz com que os resíduos sejam tratados de forma assimétrica.

Koenker e Park (1996) propuseram um algoritmo de pontos interiores que tem a finalidade de computar estimativas de regressão quantílica para casos em que a função resposta é não linear nos parâmetros. De acordo como foi descrito pelos autores, o algoritmo é apresentado a seguir. Considerando o seguinte problema não linear  $L_1$ :

$$\min_{\boldsymbol{\theta} \in \mathbb{R}^p} \sum_{i=1}^n |f_i(\boldsymbol{\theta})|$$

na qual, por exemplo,  $f_i(\boldsymbol{\theta}) = y_i - f_0(x_i, \boldsymbol{\theta})$ . A regressão  $L_1$  (ou regressão de erros absolutos) baseia-se em uma função de distância que busca minimizar a soma dos valores absolutos dos desvios (CECON et al., 2012).

Para que o vetor de parâmetros  $\boldsymbol{\theta}^*$  solucione a equação supracitada, faz-se necessário que exista um vetor  $\mathbf{d} \in [\tau - 1, \tau]^n$  para  $\tau \in (0, 1)$ , em que:

$$\begin{aligned} \mathbf{J}(\boldsymbol{\theta}^*)^T \mathbf{d} &= 0, \\ \mathbf{f}(\boldsymbol{\theta}^*)^T \mathbf{d} &= \sum_{i=1}^n |f_i(\boldsymbol{\theta}^*)|, \end{aligned}$$

tal que,  $\mathbf{f}(\boldsymbol{\theta}) = (f_i(\boldsymbol{\theta}))$  e  $\mathbf{J}(\boldsymbol{\theta}) = (\partial f_i(\boldsymbol{\theta}) / \partial \theta_j)$ .

Para resolver uma sequência de problemas lineares  $L_1$  minimizando  $\sum_{i=1}^n |f_i(\boldsymbol{\theta}) - \mathbf{J}_i(\boldsymbol{\theta})^T \boldsymbol{\delta}|$  e, a cada iteração, escolher um passo de largura  $\lambda$ , procurando nas direções resultantes  $\boldsymbol{\delta}$ . Contudo, nessa abordagem, surgem duas dificuldades: primeiramente, é necessário resolver um problema  $L_1$  a cada iteração, a segunda, refere-se as direções resultantes determinadas a cada iteração, as quais podem ser inferiores às determinadas pelas etapas iniciais do processo de solução da sequência de problemas linearizados. Desta maneira, as informações contidas nas etapas iniciais da iteração dual parecem ser mais convenientes para resolver o problema não linear, uma vez que incorporam informações locais relevantes sobre o valor atual de  $\boldsymbol{\theta}$ .

Seja  $\theta$  o valor do parâmetro na atual iteração, e o problema dual:



$$\max\{\mathbf{f}^T \mathbf{d} \mid \mathbf{d} \in [\tau - 1]^n, \mathbf{J}^T \mathbf{d} = 0\}$$

Caso o modelo fosse linear, de forma que  $\mathbf{f}(\mathbf{s}) = \mathbf{f}(\boldsymbol{\theta}) - \mathbf{K}(\mathbf{s} - \boldsymbol{\theta})$  para uma matriz  $\mathbf{K}$ , então uma solução seria possível ao aplicar o algoritmo de Meketon (1986) para encontrar  $\mathbf{d}^*$  que resolva o problema dual, calculando:

$$\boldsymbol{\delta}^* = (\mathbf{K}^T \mathbf{D}^2 \mathbf{K})^{-1} \mathbf{K}^T \mathbf{D}^2 \mathbf{f},$$

em que  $\mathbf{D} = \text{diag}(\min\{\tau - d_i^*, 1 - \tau + d_i^*\})$  e  $\boldsymbol{\theta}^* = \boldsymbol{\theta} + \boldsymbol{\delta}^*$ .

Se  $\mathbf{f}$  é não linear, não é conveniente resolver todo o problema do máximo a cada interação. Desta forma, o algoritmo segue duas etapas entre contínuas atualizações  $\mathbf{f}$  e  $\mathbf{J}$ .

O uso da regressão quantílica, em geral, tanto linear quanto não linear, é mais comum na área da economia (KOENKER e HALLOCK, 2001), contudo, tem sido aplicado em várias outras áreas, sendo ainda pouco considerada para curvas de crescimento.

## 2.7 Aplicações das curvas do modelo de von Bertalanffy

Uma das principais características de interesse dos pesquisadores é saber como se comporta o crescimento de animais, considerando a heterogeneidade de raças e tratamentos aos quais eles são submetidos e, para isso são propostos modelos de regressão não lineares, como pode ser visto nos trabalhos de Silva et al. (2011) no estudo do crescimento de vacas de corte, Neto et al. (2016) estudando o crescimento de ovinos Santa Inês, Souza et al. (2017) no estudo de crescimento de cavalos Mangalarga Marchador, Fernandes et al. (2019) no estudo de parametrizações e valores alométricos do modelo de von Bertalanffy para mamíferos de corte, Figueiredo et al. (2023) estudando um método para gerar modelos de crescimento e decrescimento obtidos a partir de composições de modelos existentes para ajustar os dados da raça de frango Atenas-Canadá, entre outros.

De acordo com Marcedo (2009), o país tem experimentado um grande desenvolvimento tecnológico e produtivo no agronegócio, ampliando suas exportações e a renda dos produtores. É inegável o avanço da agropecuária no Brasil, o que reforça a relevância dos estudos na área.

Modelos não lineares já são utilizados em trabalhos relacionados à cultura do café. Fernandes et al. (2017), por exemplo, verificaram o padrão de crescimento do fruto do cafeeiro, considerando acúmulo de massa fresca em função do tempo. Pereira et al. (2016) estudaram o crescimento vegetativo da planta do cafeeiro irrigado e não irrigado considerando diferentes densidades de plantio. No entanto, até o momento, não foi encontrado nenhum estudo utilizando modelos não lineares para descrever a perda de  $N - NH_3$  em fertilizantes na cultura do café.

A seguir, será dada uma informação mais detalhada, sobre os coelhos e fertilizantes, cujos dados de crescimento, serão utilizados nos artigos propostos.

### 2.7.1 Coelhos

O estudo das curvas de crescimento será aplicado na cunicultura, que é a parte da zootecnia que trata da criação de coelhos. Esta possui elevada importância, e tem relevância em alguns países da Europa, uma vez que, esse animal é utilizado tanto como fonte de suplemento alimentar quanto nas pesquisas de laboratório, e mais recentemente tem grande ascensão no mercado pet, setor que se encontra em destaque frente à crise econômica atual (FERNANDES et al., 2022).

Conforme Machado (2012), a cunicultura não movimenta uma parcela significativa do agrogócio brasileiro, nem emprega grande quantidade de pessoas. No entanto, deve-se levar em conta que é uma atividade estratégica devido a várias características, dentre elas, ser uma atividade sustentável, produzindo grande quantidade de alimentos de alta qualidade nutricional em curto espaço, elevada produtividade, possibilidade de aproveitamento de subprodutos, baixa necessidade de água e baixo impacto ambiental.

De acordo com Ferreira et al. (2012), o coelho doméstico é um animal de origem europeia, bastante ativo, muito social e de hábitos noturnos. Apresenta muitas vantagens biológicas, tais como, adaptação ao consumo de alimentos fibrosos por ser herbívoro, mamífero, prolífero (parindo em média de 8 a 12 láparos de cada gestação), gestação curta (31 dias) e, possui ovulação induzida pelo ato sexual, e ainda, é considerado um ótimo produtor de carne. Desde o fim da década de 1970, publica-se em livros que a carência de proteína animal constitui um dos graves problemas com que a humanidade debate e, alguns autores defendem a cunicultura como uma alternativa.

Cheeke (1987) cita a importância dos coelhos principalmente em alguns países da Europa, uma vez que este animal se apresenta como uma fonte de suplemento alimentar e é utilizado em pesquisas de laboratório. Este autor, traz as principais funções nutricionais dos coelhos (proteína, carboidrato, lipídio, mineral e vitamina) e faz um histórico com as primeiras pesquisas sobre a fonte nutricional dos mesmos.

Machado (2012), afirma que no Brasil os dados concretos sobre a produção de coelhos são escassos e pouco atualizados, sendo que, poucos estabelecimentos trabalham exclusivamente com coelhos.

A cunicultura trata da criação de coelhos domésticos de forma produtiva, econômica e racional. De acordo com o objetivo de cada produtor, a criação pode ser direcionada para: carne (caseira ou comercial); pele (artesanatos ou peleterias); pelos (feltros de roupas ou acessórios); genética e melhoramento genético (venda de matrizes e de reprodutores); animais de laboratórios (testes de vacinas) ou animais de companhia (cunicultura *Pet*). A cunicultura oferece ainda diversos sub e co-produtos como o couro (indústria da moda e vestuário); as orelhas (produção de gelatina e petiscos para cães); as patas e a cauda (confeção de amuletos e chaveiros); o sangue (meio de cultura específico); o cérebro (purificação da tromboplastina); as fezes (adubação orgânica) e ainda a urina (veículo de perfumes) (FERREIRA et al., 2012).

A raça Nova Zelândia é a mais popular entre todas de coelhos, não só no Brasil, mas em grande parte do mundo. Apesar do nome, a raça Nova Zelândia é de origem americana. A raça apresenta boa proporção corporal, tendo garupa arredondada, região lombar musculosa e costelas com boa cobertura muscular, propiciando carcaças de ótima qualidade e rendimento. São animais muito rústicos, altamente precoces (chegam a pesar de 1800 a 2000g em oito a dez semanas) e bastante prolíferos sendo uma excelente opção para cruzamentos com outras raças. A pelagem é uniforme, brilhante e densa, a pele do NZB é facilmente comercializada pela possibilidade do tingimento em diversas cores.

### **2.7.2 Fertilizantes**

A produtividade das culturas depende, dentre outros fatores, do adequado suprimento de nutrientes, o que acontece normalmente via adubação com fertilizantes, sendo que, esta prática é essencial nos solos brasileiros (BEDIN, 2003; DE SOUZA et al., 2023).

A eficiência agronômica dos fertilizantes convencionais e a redução da perda de nitrogênio (N) são os principais objetivos no manejo da fertilidade, pois essas práticas reduzem os custos de produção e os impactos ambientais negativos (FAN et al., 2010).

Determinar o manejo ideal de nitrogênio (N) é essencial para manter a produtividade do cafeeiro, desta forma, utiliza-se fertilizantes convencionais e de eficiência aumentada buscando a redução da perda de N, pois essas práticas reduzem os custos de produção e os impactos ambientais negativos (DOMINGHETTI et al., 2016). O aumento da eficiência da fertilização com N de culturas agrícolas tem sido uma grande preocupação por décadas. Desta forma, pesquisa intensiva visa solucionar a ameaça de perda de N na forma de amônia (SOUZA et al., 2017b).

### **3 CONSIDERAÇÕES GERAIS**

O presente referencial foi utilizado como base teórica para construção dos três artigos propostos nesta tese, os quais serão apresentados na segunda parte deste trabalho.

## REFERÊNCIAS

- BEDIN, I. et al. Fertilizantes fosfatados e produção da soja em solos com diferentes capacidades tampão de fosfato. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, v. 27, n. 4, p. 639-646, 2003.
- BREUSCH, T.; PAGAN, A. Teste simples para heterocedasticidade e coeficiente de variação aleatória econométrica. **Sociedade Econométrica**, Rio de Janeiro, v. 47, p. 1287-11294, 1979.
- BRUNNER, N.; KÜHLEITNER, M.; RENNER-MARTIN, K. Bertalanffy-Pütter models for avian growth. **Plos one**, v. 16, n. 4, p. e0250515, 2021.
- BURNHAM, K. P.; ANDERSON, D. R. Multimodel inference: understanding AIC and BIC in model selection. **Sociological methods and research**. Beverly Hills, v. 33, n. 2, p. 261-304, 2004.
- CALBO, A. G. et al. Ajuste de funções não lineares de crescimento. **Revista Brasileira de Fisiologia Vegetal**, Londrina, v.1, n.1, p. 9-18, 1989.
- CARINI, F. et al. Nonlinear models for describing lettuce growth in autumn-winter. **Ciência Rural**, v. 50, 2020.
- CASSIANO, F. R.; SÁFADI, T. Modelos de crescimento animal para tempos irregulares. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**, v. 50, n. 11, p. 1114-1119, 2015.
- CECON, P. R.; SILVA, A. R.; NASCIMENTO, M.; FERREIRA, A. **Métodos Estatísticos**. 1. ed., Viçosa: UFV, 229p., 2012.
- CHEEKE, P. R. **Rabbit feeding and nutrition**. Orlando, Florida: Academic Press. INC, 1987.
- CONAB, CN de A. **Acompanhamento da safra brasileira de café safra 2022**. Quarto levantamento, Brasília, v. 9, n. 4, p. 1-53, 2022.
- CORDEIRO, G. M. et al. Uma revisão dos modelos normais não-lineares. **Revista Brasileira de Biometria**, v. 27, n. 3, p. 360-393, 2009.
- DARVEAU, C. A. et al. Allometric cascade as a unifying principle of body mass effects on metabolism. **Nature**, v. 417, n. 6885, p. 166-170, 2002.
- DE SOUZA, T. L. et al. Nitrogen fertilizer technologies: Opportunities to improve nutrient use efficiency towards sustainable coffee production systems. **Agriculture, Ecosystems & Environment**, v. 345, p. 108317, 2023.

DIEL, M. I. et al. Behavior of strawberry production with growth models: a multivariate approach. **Acta Scientiarum. Agronomy**, v. 43, p. 2-11, 2021.

DODDS, P. S. et al. Re-examination of the “3/4-law” of metabolism. **Journal of theoretical biology**, v. 209, n. 1, p. 9-27, 2001.

DOMINGHETTI, A. W. et al. Nitrogen loss by volatilization of nitrogen fertilizers applied to coffee orchard. **Ciência e Agrotecnologia**, v. 40, n. 2, p. 173-183, 2016.

DRAPER, N.R.; SMITH, H. **Applied regression analysis**. 3<sup>rd</sup> ed. New York: J. Wiley, 1998. 706 p.

DURBIN, J.; WATSON, G. S. Testing for serial correlation in least squares regression: I. **Biometrika**, London, v. 37, p. 409-428, 1950.

EHNES, R. B. et al. Phylogenetic grouping, curvature and metabolic scaling in terrestrial invertebrates. **Ecology Letters**, v. 14, n. 10, p. 993-1000, 2011.

FALCÃO, P. F. et al. Curvas de crescimento de cordeiros da raça Ile de France criados em confinamento. **Revista Brasileira de Saúde e Produção Animal**, v. 16, n. 2, p. 377-386, 2015.

FAN, X. H.; LI, Y. C. Nitrogen release from slow-release fertilizers as affect by soil type and temperature. **Soil Science Society American Journal**, v. 74, n.5, p. 1635-1641, 2010.

FAOSTAT, **Food and Agriculture Organization Corporate Statistical Database (2017)**. Disponível em: <<http://www.fao.org/faostat/en/#data/QL>>. Acesso em 02 fevereiro de 2019.

FERNANDES, F. A. et al. Parameterizations of the von Bertalanffy model for description of growth curves. **Revista Brasileira de Biometria**. v. 38, n. 3, p. 369-384, 2020. Available from: <<http://www.biometria.ufla.br/index.php/BBJ/article/view/457>>. Accessed: jul 15, 2020. doi: <https://doi.org/10.28951/rbb.v38i3.457>.

FERNANDES, F. A. et al. Growth curves of meat-producing mammals by von Bertalanffy's model. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**, v. 54, 2019.

FERNANDES, F. A. et al. Cross-sectional and longitudinal method for describing growth curve of rabbits. **Arquivo Brasileiro de Medicina Veterinária e Zootecnia**, v. 74, p. 731-740, 2022.

FERNANDES, T.J. et al. Modelos duplo sigmoidais na descrição do crescimento de frutos do cafeeiro. **Ciência Rural**, v. 47, n. 8, 2017.

FERNANDES, T. J. et al. Parameterization effects in nonlinear models to describe growth curves. **Acta Scientiarum. Technology**, v. 37, n. 4, p. 397-402, 2015.

FERREIRA, W. M. et al. **Manual prático de cunicultura**. Bambuí: Ed. do Autor, 2012.

FIGUEIREDO, M. P. S. et al. Method to generate growth and degrowth models obtained from existing models compositions applied to animal sciences–The Athens-Canadian chicken growth case. **Livestock Science**, p. 105162, 2023.

FONSECA, M. A. R. **Álgebra Linear Aplicada - a Finanças, Economia e Econometria**. 1ª. ed. Barueri, SP: Editora Manole, 2003.

FREITAS, Alfredo Ribeiro de. Curvas de crescimento na produção animal. **Revista Brasileira de Zootecnia**, v. 34, n. 3, p. 786-795, 2005.

FRITZSCHE, H. **Programação não-linear: análise e métodos**. São Paulo: Edgard Blücher, Ed. da Universidade de São Paulo, 1978. 170 p.

FRÜHAUF, A.C. et al. Nonlinear models in the study of the cedar diametric growth in a seasonally dry tropical forest. **Revista Brasileira de Ciências Agrárias**, v. 15, n. 4, p. 1-8, 2020.

GALARZA, C. E. et al. Quantile regression for nonlinear mixed effects models: a likelihood based perspective. **Statistical Papers**, v. 61, n. 3, p. 1281-1307, 2020.

GALLANT, A. R. **Nonlinear statistical models**. New York: J. Wiley, 1987. 624 p.

GARUTTI, V. **Piscicultura ecológica**. Editora Unesp, São Paulo, 2003.

GAZOLA, S. et al. Modelos não lineares na análise de percentual germinativo de sementes de milho. **Revista Brasileira de Milho e Sorgo**, v. 16, n. 1, p. 142-152, 2017.

GELMAN, A.; HILL, J.; VEHTARI, A. **Regression and other stories**. Cambridge University Press, 2020.

GOODALL E.A., SPREVAK D. A note on a stochastic model to describe the milk yield of a dairy cow. **Animal Production**, 38: 133-136, 1984.

GUPTA, J. P. et al. Modeling of growth curve in farm bred broiler rabbits in organized rabbitry. **Indian Journal of Animal Sciences**, v. 92, n. 12, p. 1476-1481, 2022.

HYNDMAN, R.; FAN, Y. Sample quantiles in statistical packages. **The American Statistician**, v. 50, n. 4, p. 361-365, 1996.

INSTITUTO BRASILEIRO DE GEOGRAFIA E ESTATÍSTICA (IBGE). **Estatística da Produção Pecuária** abr.-jun. 2018. Publicado em 12.09.2018 às 09:00. Disponível em: <ftp://ftp.ibge.gov.br/Producao\_Pecuaria/Fasciculo\_Indicadores\_IBGE/abate-leite-couro-ovos\_201802caderno.pdf>. Acesso em 29 novembro de 2020.



- JANE, S. A. et al. Adjusting the growth curve of sugarcane varieties using nonlinear models. **Ciência Rural**, v. 50, n. 3, p. 1-10, 2020. Available from: [https://www.scielo.br/scielo.php?pid=S0103-84782020000300204&script=sci\\_arttext](https://www.scielo.br/scielo.php?pid=S0103-84782020000300204&script=sci_arttext). Accessed: jul 10, 2020. doi: <http://dx.doi.org/10.1590/0103-8478cr20190408>.
- KLEIBER, M. Body size and metabolism. **Hilgardia**, v. 6, n. 11, p. 315–353, 1932.
- KOENKER, R.; HALLOCK, K. F. Quantile regression. **Journal of economic perspectives**, v. 15, n. 4, p. 143-156, 2001.
- KOENKER, R. **Quantile Regression**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2005. 349 p.
- KOENKER, R.; PARK, B.J. An interior point algorithm for nonlinear quantile regression. **Journal of Econometrics**, 71, 265-283. 1996.
- KOENKER, R. Quantile regression: 40 years on. **Annual review of economics**, v. 9, p. 155-176, 2017.
- LIMA, K. P. de. **Uso de modelos não lineares na descrição do acúmulo de boro em diferentes partes do feijoeiro cultivar Jalo**. 2016. 81 p. Dissertação (Mestrado em Estatística e Experimentação Agropecuária)-Universidade Federal de Lavras, Lavras, 2016.
- LIMA, K. P. et al. Ajuste de modelos nao lineares para descricao do fruto cajá-manga. **Sigmae**, v. 8, n. 2, p. 221-226, 2019.
- LOPEZ, B. et al. Characterization of the commercial growth curves of Spanish Merino, Fleischschaf, and crossbred lambs in an associative economy context. **Small Ruminant Research**, v. 164, p. 8-14, 2018.
- MACHADO, L. C. Opinião: panorama da cunicultura brasileira. **Revista Brasileira de Cunicultura**, v. 2, n. 1, 2012.
- MAZUCHELI, J.; ACHCAR, J. A. Algumas considerações em regressão não-linear. **Acta Scientiarum**, Maringá, v. 24, n. 6, p. 1761-1770, 2002.
- MAZZINI, A. R. et al. Curva de crescimento de novilhos Hereford: heterocedasticidade e resíduos autorregressivos. **Ciência Rural**, v. 35, n. 2, p. 422-427, 2005.
- MISCHAN, M. M.; PINHO, S. Z. **Modelos não lineares: Funções assintóticas de crescimento**, 2014. 181 p.
- MORALES, C. M. et al. Robust quantile regression using a generalized class of skewed distributions. **Stat**, v. 6, n. 1, p. 113-130, 2017.

MORETTIN, P. A.; TOLOI, C. **Análise de séries temporais**. [S.l.]: Blucher, 2006.

MOTULSKY, H.; CHRISTOPOULOS, A. **Fitting models to biological data using linear and nonlinear regression. A practical guide to curve fitting**. New York, Oxford University Press, 2004. 351 p.

MUIANGA, C. A. et al. Descrição da curva de crescimento de frutos do cajueiro por modelos não lineares. **Revista Brasileira de Fruticultura**, v. 38, n. 1, p. 22-32, 2016.

NETO, M. R. T. et al. Descrição do crescimento de ovinos Santa Inês utilizando modelos não-lineares selecionados por análise multivariada. **Revista Brasileira de Saúde e Produção Animal**, v. 17, n. 1, p. 26-36, 2016.

OHNISHI, S. et al. On the analytical solution for the Pütter–Bertalanffy growth equation. **Journal of theoretical biology**, v. 343, p. 174-177, 2014.

PEIXE BR. ANUÁRIO **PeixeBR da Piscicultura 2019**, São Paulo, 2019.

PEREIRA, A. A et al. Modelagem não linear do crescimento em altura do cafeeiro irrigado e não irrigado em diferentes densidades. **Irriga** (UNESP Botucatu), v. 1, p. 140-149, 2016.

PRADO, T. et al. Ajuste do modelo logístico na descrição do crescimento de frutos de coqueiro anão por meio de algoritmos iterativos mcmc. **Revista Brasileira de Biometria**, v. 31, n. 2, 2013.

PUIATTI, G. A. et al. Nonlinear quantile regression to describe the dry matter accumulation of garlic plants. **Ciência Rural**, v. 50, n. 1, p. 1–8, 2020.

RODRIGUES, A. et al. Isotonic regression analysis of Guzerá cattle growth curves. **Revista Ceres**, v. 65, n. 1, p. 24-27, 2018.

SANTORO, K. R. et al. Estimativas de parâmetros de curvas de crescimento de bovinos zebu, criados no estado de Pernambuco. **Revista Brasileira de Zootecnia**, v. 34, n. 6, p. 2262-2279, 2005.

SARI, B G et al. Nonlinear growth models: An alternative to ANOVA in tomato trials evaluation. **European Journal of Agronomy**, v. 104, p. 21-36, 2019.

SEBER, G. A. F.; WILD, C. J. **Nonlinear regression**. New Jersey: J Wiley, 1989. 752 p.

SCAPIM, J.; BASSANEZI R. C. Modelo de Von Bertalanffy generalizado aplicado a curvas de crescimento animal. **Biomatemática** (UNICAMP)(1679-365X), Campinas-SP, p. 1-14, 2008.

SHAPIRO, S. S.; WILK, M. B. An analysis of variance test for normality (complete samples). **Biometrika**, Cambridge, v. 52, n. 3/4, p. 591-611, 1965.

- SHI, P-J. et al. On the 3/4-exponent von Bertalanffy equation for ontogenetic growth. **Ecological modelling**, v. 276, p. 23-28, 2014.
- SILVA, É. M. da et al. Description of blackberry fruit growth by nonlinear regression models. *Revista Brasileira de Fruticultura*, v. 42, n. 2, 2020.
- SILVA, F. L. et al. Curvas de crescimento em vacas de corte de diferentes tipos biológicos. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**, v. 46, n. 3, p. 262-271, 2011.
- SILVEIRA, F. G. et al. Análise de agrupamento na seleção de modelos de regressão não-lineares para curvas de crescimento de ovinos cruzados. **Ciência Rural**, v. 41, n. 4, 2011.
- SOUZA, E. M. et al. Modelagem não linear da extração de zinco de um solo tratado com lodo de esgoto. **Acta Scientiarum. Technology**, Maringá-PR, v. 32, n. 2, 2010.
- SOUZA, F. A. C. et al. Nonlinear modeling growth body weight of Mangalarga Marchador horses. **Ciência Rural**, v. 47, n. 4, 2017.
- SOUZA, T. L. de et al. Ammonia and carbon dioxide emissions by stabilized conventional nitrogen fertilizers and controlled release in corn crop. **Ciência e Agrotecnologia**, v. 41, n. 5, p. 494-510, 2017b.
- von BERTALANFFY, L. A quantitative theory of organic growth (inquiries on growth laws. II). **Human biology**, v. 10, n. 2, p. 181-213, 1938.
- von BERTALANFFY, L. Untersuchungen über die Gesetzmäßigkeit des Wachstums. VII, Stoffwechselltypen und Wachstumstypen. **Biol. Zentralbl**, v. 61, p. 510-532, 1941.
- von BERTALANFFY, L. Quantitative laws in metabolism and growth. **The quarterly review of biology**, v. 32, n. 3, p. 217-231, 1957.
- WEISBERG, S. **Applied linear regression** 3<sup>rd</sup> ed. Hoboken: J. Wiley, 2005. 352 p.
- WEST, G. B. et al. Allometric scaling of metabolic rate from molecules and mitochondria to cells and mammals. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, v. 99, n. suppl 1, p. 2473-2478, 2002.
- WHITE, C. R.; SEYMOUR, R. S. Mammalian basal metabolic rate is proportional to body mass<sup>2/3</sup>. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, v. 100, n. 7, p. 4046-4049, 2003.

**REFERÊNCIAS**

- BEDIN, I. et al. Fertilizantes fosfatados e produção da soja em solos com diferentes capacidades tampão de fosfato. **Revista Brasileira de Ciência do Solo**, v. 27, n. 4, p. 639-646, 2003.
- BREUSCH, T.; PAGAN, A. Teste simples para heterocedasticidade e coeficiente de variação aleatória econométrica. **Sociedade Econométrica**, Rio de Janeiro, v. 47, p. 1287-11294, 1979.
- BRUNNER, N.; KÜHLEITNER, M.; RENNER-MARTIN, K. Bertalanffy-Pütter models for avian growth. **Plos one**, v. 16, n. 4, p. e0250515, 2021.
- BURNHAM, K. P.; ANDERSON, D. R. Multimodel inference: understanding AIC and BIC in model selection. **Sociological methods and research**. Beverly Hills, v. 33, n. 2, p. 261-304, 2004.
- CALBO, A. G. et al. Ajuste de funções não lineares de crescimento. **Revista Brasileira de Fisiologia Vegetal**, Londrina, v.1, n.1, p. 9-18, 1989.
- CARINI, F. et al. Nonlinear models for describing lettuce growth in autumn-winter. **Ciência Rural**, v. 50, 2020.
- CASSIANO, F. R.; SÁFADI, T. Modelos de crescimento animal para tempos irregulares. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**, v. 50, n. 11, p. 1114-1119, 2015.
- CECON, P. R.; SILVA, A. R.; NASCIMENTO, M.; FERREIRA, A. **Métodos Estatísticos**. 1. ed., Viçosa: UFV, 229p., 2012.
- CHEEKE, P. R. **Rabbit feeding and nutrition**. Orlando, Florida: Academic Press. INC, 1987.
- CONAB, CN de A. **Acompanhamento da safra brasileira de café safra 2022**. Quarto levantamento, Brasília, v. 9, n. 4, p. 1-53, 2022.
- CORDEIRO, G. M. et al. Uma revisão dos modelos normais não-lineares. **Revista Brasileira de Biometria**, v. 27, n. 3, p. 360-393, 2009.
- DARVEAU, C. A. et al. Allometric cascade as a unifying principle of body mass effects on metabolism. **Nature**, v. 417, n. 6885, p. 166-170, 2002.
- DE SOUZA, T. L. et al. Nitrogen fertilizer technologies: Opportunities to improve nutrient use efficiency towards sustainable coffee production systems. **Agriculture, Ecosystems & Environment**, v. 345, p. 108317, 2023.

- DIEL, M. I. et al. Behavior of strawberry production with growth models: a multivariate approach. **Acta Scientiarum. Agronomy**, v. 43, p. 2-11, 2021.
- DODDS, P. S. et al. Re-examination of the “3/4-law” of metabolism. **Journal of theoretical biology**, v. 209, n. 1, p. 9-27, 2001.
- DOMINGHETTI, A. W. et al. Nitrogen loss by volatilization of nitrogen fertilizers applied to coffee orchard. **Ciência e Agrotecnologia**, v. 40, n. 2, p. 173-183, 2016.
- DRAPER, N.R.; SMITH, H. **Applied regression analysis**. 3<sup>rd</sup> ed. New York: J. Wiley, 1998. 706 p.
- DURBIN, J.; WATSON, G. S. Testing for serial correlation in least squares regression: I. **Biometrika**, London, v. 37, p. 409-428, 1950.
- EHNES, R. B. et al. Phylogenetic grouping, curvature and metabolic scaling in terrestrial invertebrates. **Ecology Letters**, v. 14, n. 10, p. 993-1000, 2011.
- FALCÃO, P. F. et al. Curvas de crescimento de cordeiros da raça Ile de France criados em confinamento. **Revista Brasileira de Saúde e Produção Animal**, v. 16, n. 2, p. 377-386, 2015.
- FAN, X. H.; LI, Y. C. Nitrogen release from slow-release fertilizers as affect by soil type and temperature. **Soil Science Society American Journal**, v. 74, n.5, p. 1635-1641, 2010.
- FAOSTAT, **Food and Agriculture Organization Corporate Statistical Database (2017)**. Disponível em: <<http://www.fao.org/faostat/en/#data/QL>>. Acesso em 02 fevereiro de 2019.
- FERNANDES, F. A. et al. Parameterizations of the von Bertalanffy model for description of growth curves. **Revista Brasileira de Biometria**. v. 38, n. 3, p. 369-384, 2020. Available from: <<http://www.biometria.ufla.br/index.php/BBJ/article/view/457>>. Accessed: jul 15, 2020. doi: <https://doi.org/10.28951/rbb.v38i3.457>.
- FERNANDES, F. A. et al. Growth curves of meat-producing mammals by von Bertalanffy’s model. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**, v. 54, 2019.
- FERNANDES, F. A. et al. Cross-sectional and longitudinal method for describing growth curve of rabbits. **Arquivo Brasileiro de Medicina Veterinária e Zootecnia**, v. 74, p. 731-740, 2022.
- FERNANDES, T.J. et al. Modelos duplo sigmoidais na descrição do crescimento de frutos do cafeeiro. **Ciência Rural**, v. 47, n. 8, 2017.
- FERNANDES, T. J. et al. Parameterization effects in nonlinear models to describe growth curves. **Acta Scientiarum. Technology**, v. 37, n. 4, p. 397-402, 2015.

FERREIRA, W. M. et al. **Manual prático de cunicultura**. Bambuí: Ed. do Autor, 2012.

FIGUEIREDO, M. P. S. et al. Method to generate growth and degrowth models obtained from existing models compositions applied to animal sciences–The Athens-Canadian chicken growth case. **Livestock Science**, p. 105162, 2023.

FONSECA, M. A. R. **Álgebra Linear Aplicada - a Finanças, Economia e Econometria**. 1<sup>a</sup>. ed. Barueri, SP: Editora Manole, 2003.

FREITAS, Alfredo Ribeiro de. Curvas de crescimento na produção animal. **Revista Brasileira de Zootecnia**, v. 34, n. 3, p. 786-795, 2005.

FRITZSCHE, H. **Programação não-linear: análise e métodos**. São Paulo: Edgard Blücher, Ed. da Universidade de São Paulo, 1978. 170 p.

FRÜHAUF, A.C. et al. Nonlinear models in the study of the cedar diametric growth in a seasonally dry tropical forest. **Revista Brasileira de Ciências Agrárias**, v. 15, n. 4, p. 1-8, 2020.

GALARZA, C. E. et al. Quantile regression for nonlinear mixed effects models: a likelihood based perspective. **Statistical Papers**, v. 61, n. 3, p. 1281-1307, 2020.

GALLANT, A. R. **Nonlinear statistical models**. New York: J. Wiley, 1987. 624 p.

GARUTTI, V. **Piscicultura ecológica**. Editora Unesp, São Paulo, 2003.

GAZOLA, S. et al. Modelos não lineares na análise de percentual germinativo de sementes de milho. **Revista Brasileira de Milho e Sorgo**, v. 16, n. 1, p. 142-152, 2017.

GELMAN, A.; HILL, J.; VEHTARI, A. **Regression and other stories**. Cambridge University Press, 2020.

GOODALL E.A., SPREVAK D. A note on a stochastic model to describe the milk yield of a dairy cow. **Animal Production**, 38: 133-136, 1984.

GUPTA, J. P. et al. Modeling of growth curve in farm bred broiler rabbits in organized rabbitry. **Indian Journal of Animal Sciences**, v. 92, n. 12, p. 1476-1481, 2022.

HYNDMAN, R.; FAN, Y. Sample quantiles in statistical packages. **The American Statistician**, v. 50, n. 4, p. 361-365, 1996.

INSTITUTO BRASILEIRO DE GEOGRAFIA E ESTATÍSTICA (IBGE). **Estatística da Produção Pecuária** abr.-jun. 2018. Publicado em 12.09.2018 às 09:00. Disponível em: <ftp://ftp.ibge.gov.br/Producao\_Pecuaria/Fasciculo\_Indicadores\_IBGE/abate-leite-couro-ovos\_201802caderno.pdf>. Acesso em 29 novembro de 2020.

- JANE, S. A. et al. Adjusting the growth curve of sugarcane varieties using nonlinear models. **Ciência Rural**, v. 50, n. 3, p. 1-10, 2020. Available from: [https://www.scielo.br/scielo.php?pid=S0103-84782020000300204&script=sci\\_arttext](https://www.scielo.br/scielo.php?pid=S0103-84782020000300204&script=sci_arttext). Accessed: jul 10, 2020. doi: <http://dx.doi.org/10.1590/0103-8478cr20190408>.
- KLEIBER, M. Body size and metabolism. **Hilgardia**, v. 6, n. 11, p. 315–353, 1932.
- KOENKER, R.; HALLOCK, K. F. Quantile regression. **Journal of economic perspectives**, v. 15, n. 4, p. 143-156, 2001.
- KOENKER, R. **Quantile Regression**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2005. 349 p.
- KOENKER, R.; PARK, B.J. An interior point algorithm for nonlinear quantile regression. **Journal of Econometrics**, 71, 265-283. 1996.
- KOENKER, R. Quantile regression: 40 years on. **Annual review of economics**, v. 9, p. 155-176, 2017.
- LIMA, K. P. de. **Uso de modelos não lineares na descrição do acúmulo de boro em diferentes partes do feijoeiro cultivar Jalo**. 2016. 81 p. Dissertação (Mestrado em Estatística e Experimentação Agropecuária)-Universidade Federal de Lavras, Lavras, 2016.
- LIMA, K. P. et al. Ajuste de modelos nao lineares para descricao do fruto cajá-manga. **Sigmae**, v. 8, n. 2, p. 221-226, 2019.
- LOPEZ, B. et al. Characterization of the commercial growth curves of Spanish Merino, Fleischschaf, and crossbred lambs in an associative economy context. **Small Ruminant Research**, v. 164, p. 8-14, 2018.
- MACHADO, L. C. Opinião: panorama da cunicultura brasileira. **Revista Brasileira de Cunicultura**, v. 2, n. 1, 2012.
- MAZUCHELI, J.; ACHCAR, J. A. Algumas considerações em regressão não-linear. **Acta Scientiarum**, Maringá, v. 24, n. 6, p. 1761-1770, 2002.
- MAZZINI, A. R. et al. Curva de crescimento de novilhos Hereford: heterocedasticidade e resíduos autorregressivos. **Ciência Rural**, v. 35, n. 2, p. 422-427, 2005.
- MISCHAN, M. M.; PINHO, S. Z. **Modelos não lineares: Funções assintóticas de crescimento**, 2014. 181 p.
- MORALES, C. M. et al. Robust quantile regression using a generalized class of skewed distributions. **Stat**, v. 6, n. 1, p. 113-130, 2017.

MORETTIN, P. A.; TOLOI, C. **Análise de séries temporais**. [S.l.]: Blucher, 2006.

MOTULSKY, H.; CHRISTOPOULOS, A. **Fitting models to biological data using linear and nonlinear regression. A practical guide to curve fitting**. New York, Oxford University Press, 2004. 351 p.

MUIANGA, C. A. et al. Descrição da curva de crescimento de frutos do cajueiro por modelos não lineares. **Revista Brasileira de Fruticultura**, v. 38, n. 1, p. 22-32, 2016.

NETO, M. R. T. et al. Descrição do crescimento de ovinos Santa Inês utilizando modelos não-lineares selecionados por análise multivariada. **Revista Brasileira de Saúde e Produção Animal**, v. 17, n. 1, p. 26-36, 2016.

OHNISHI, S. et al. On the analytical solution for the Pütter–Bertalanffy growth equation. **Journal of theoretical biology**, v. 343, p. 174-177, 2014.

PEIXE BR. ANUÁRIO **PeixeBR da Piscicultura 2019**, São Paulo, 2019.

PEREIRA, A. A et al. Modelagem não linear do crescimento em altura do cafeeiro irrigado e não irrigado em diferentes densidades. **Irriga** (UNESP Botucatu), v. 1, p. 140-149, 2016.

PRADO, T. et al. Ajuste do modelo logístico na descrição do crescimento de frutos de coqueiro anão por meio de algoritmos iterativos mcmc. **Revista Brasileira de Biometria**, v. 31, n. 2, 2013.

PUIATTI, G. A. et al. Nonlinear quantile regression to describe the dry matter accumulation of garlic plants. **Ciência Rural**, v. 50, n. 1, p. 1–8, 2020.

RODRIGUES, A. et al. Isotonic regression analysis of Guzerá cattle growth curves. **Revista Ceres**, v. 65, n. 1, p. 24-27, 2018.

SANTORO, K. R. et al. Estimativas de parâmetros de curvas de crescimento de bovinos zebu, criados no estado de Pernambuco. **Revista Brasileira de Zootecnia**, v. 34, n. 6, p. 2262-2279, 2005.

SARI, B G et al. Nonlinear growth models: An alternative to ANOVA in tomato trials evaluation. **European Journal of Agronomy**, v. 104, p. 21-36, 2019.

SEBER, G. A. F.; WILD, C. J. **Nonlinear regression**. New Jersey: J Wiley, 1989. 752 p.

SCAPIM, J.; BASSANEZI R. C. Modelo de Von Bertalanffy generalizado aplicado a curvas de crescimento animal. **Biomatemática** (UNICAMP)(1679-365X), Campinas-SP, p. 1-14, 2008.

SHAPIRO, S. S.; WILK, M. B. An analysis of variance test for normality (complete samples). **Biometrika**, Cambridge, v. 52, n. 3/4, p. 591-611, 1965.



- SHI, P-J. et al. On the 3/4-exponent von Bertalanffy equation for ontogenetic growth. **Ecological modelling**, v. 276, p. 23-28, 2014.
- SILVA, É. M. da et al. Description of blackberry fruit growth by nonlinear regression models. *Revista Brasileira de Fruticultura*, v. 42, n. 2, 2020.
- SILVA, F. L. et al. Curvas de crescimento em vacas de corte de diferentes tipos biológicos. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**, v. 46, n. 3, p. 262-271, 2011.
- SILVEIRA, F. G. et al. Análise de agrupamento na seleção de modelos de regressão não-lineares para curvas de crescimento de ovinos cruzados. **Ciência Rural**, v. 41, n. 4, 2011.
- SOUZA, E. M. et al. Modelagem não linear da extração de zinco de um solo tratado com lodo de esgoto. **Acta Scientiarum. Technology**, Maringá-PR, v. 32, n. 2, 2010.
- SOUZA, F. A. C. et al. Nonlinear modeling growth body weight of Mangalarga Marchador horses. **Ciência Rural**, v. 47, n. 4, 2017.
- SOUZA, T. L. de et al. Ammonia and carbon dioxide emissions by stabilized conventional nitrogen fertilizers and controlled release in corn crop. **Ciência e Agrotecnologia**, v. 41, n. 5, p. 494-510, 2017b.
- von BERTALANFFY, L. A quantitative theory of organic growth (inquiries on growth laws. II). **Human biology**, v. 10, n. 2, p. 181-213, 1938.
- von BERTALANFFY, L. Untersuchungen über die Gesetzmäßigkeit des Wachstums. VII, Stoffwechselltypen und Wachstumstypen. **Biol. Zentralbl**, v. 61, p. 510-532, 1941.
- von BERTALANFFY, L. Quantitative laws in metabolism and growth. **The quarterly review of biology**, v. 32, n. 3, p. 217-231, 1957.
- WEISBERG, S. **Applied linear regression** 3<sup>rd</sup> ed. Hoboken: J. Wiley, 2005. 352 p.
- WEST, G. B. et al. Allometric scaling of metabolic rate from molecules and mitochondria to cells and mammals. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, v. 99, n. suppl 1, p. 2473-2478, 2002.
- WHITE, C. R.; SEYMOUR, R. S. Mammalian basal metabolic rate is proportional to body mass<sup>2/3</sup>. **Proceedings of the National Academy of Sciences**, v. 100, n. 7, p. 4046-4049, 2003.

## **SEGUNDA PARTE**

**ARTIGO 1****Cross-sectional and longitudinal method for describing growth curve of rabbits**






Publicado na revista Arquivo Brasileiro de Medicina Veterinária e Zootecnia

Doi: 10.1590/1678-4162-12534

Normas do periódico (versão publicada)

## Cross-sectional and longitudinal method for describing growth curve of rabbits

[Método transversal e longitudinal para descrição da curva de crescimento de coelhos]

F.A. Fernandes<sup>1</sup>, M.A.J.G. Silva<sup>2</sup>, W.D. Silva<sup>3</sup>, T.J. Fernandes<sup>4</sup>, J.A. Muniz<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Graduate, Universidade Federal de Lavras, Instituto de Ciências Exatas e Tecnológicas, Lavras, MG, Brasil

<sup>2</sup>Graduate, Universidade Federal de Lavras, Faculdade de Zootecnia e Medicina Veterinária, Lavras, MG, Brasil

<sup>3</sup>Undergraduate, Universidade Federal de Lavras, Faculdade de Zootecnia e

Medicina Veterinária, Lavras, MG, Brasil

<sup>4</sup>Universidade Federal de Lavras, Instituto de Ciências Exatas e Tecnológicas, Lavras, MG, Brasil

### ABSTRACT

Rabbit farming is an activity with high growth potential due to its easy handling, high prolificacy, low polluting impact, and easy adaptability to family farming systems, producing meat of high biological value. Therefore, the aim of this work was to evaluate, using von Bertalanffy's nonlinear model, growth curves of weight as a function of age in 'Flemish Giant Rabbits' and 'New Zealand White' crossbred rabbits. Two different data collections were used: the longitudinal method and the cross-sectional method. The experiment was carried out at the Federal University of Lavras, located in the municipality of Lavras, Minas Gerais, Brazil, where 10 crossbred rabbits were evaluated, and animals were weighed from 0 to 150 days of age. Both methods proved to be adequate to describe the development of rabbits and the cross-sectional method proved to be an adequate alternative to obtention of growth curves, saving time in data collection and showing consistent estimates.

Keywords: growth curves, rabbit farming, regression, modeling, von Bertalanffy

### RESUMO

A cunicultura é uma atividade com alto potencial de crescimento devido à facilidade em seu manejo e à alta prolificidade, por apresentar baixo impacto poluidor, por se enquadrar bem em sistemas próprios de agricultura familiar, além de produzir carne de alto valor biológico. Diante disso, o objetivo deste trabalho foi avaliar, por meio do modelo não linear de von Bertalanffy, curvas de crescimento de coelhos mestiços de Gigante de Flandres e Nova Zelândia Branco, utilizando-se dois métodos distintos da coleta dos dados: o método longitudinal e o método transversal, a fim de estimar o crescimento do peso em função da idade. O experimento foi realizado na Universidade Federal de Lavras, situado no município de Lavras, Minas Gerais, Brasil. Foram avaliados 10 coelhos mestiços, cuja pesagem foi realizada de 0 a 150 dias de idade. Os dois métodos se mostraram adequados para descrever o crescimento de coelhos, e o método transversal se revelou uma boa alternativa, com ganho de tempo na coleta dos dados e apresentando estimativas consistentes.

Palavras-chave: curvas de crescimento, regressão, modelagem, von Bertalanffy

### INTRODUCTION

Appropriate rabbit breeding management it is very important, because it is related to the growth. Rabbits have a high growth rate (Marín-García *et al.*, 2020), and in the post-weaning phase (from the 28th day of age) is the time

when the greatest influence of daily management occurs, which is directly correlated with animal breed, food quality, health and thermal environment in which the animals will be submitted throughout the breeding period (Ferreira *et al.*, 2012).

Thus, it is important to evaluate methods that can model the growth traits of these animals in view of the importance of management in rabbit in

cages. In addition, the use of new technologies that enable increasing the rabbit selection accuracy and reducing intervals between generations are of great value to maximize production, avoiding economic losses (Migdal *et al.*, 2018; Petrescu and Petrescu-Mag, 2018).

The von Bertalanffy's nonlinear model is widely used in several areas when a functional relationship of a response variable with one or more explanatory variables is searched (Bertalanffy, 1957; Mischán and Pinho, 2014; Lee *et al.*, 2020). Thus, the use of this model for the study of natural phenomena is appropriate, especially when it comes to animal growth, since these events do not always behave in a linear manner and depend on multiple factors, ranging from diet composition to social classification of animals. This model also has the advantage of presenting good adjustment quality with small number of parameters with biological interpretations (Kühleitner *et al.*, 2019; Brunner *et al.*, 2021). According to Teleken *et al.* (2017), the von Bertalanffy's model was the most suitable among all others to describe the growth of 'Nova Zelândia' rabbits.

The evaluation of the animal growth and development process, measured by the increase in morphometric measurements over time, is fundamental for the proper management of the species, allowing the establishment of strategies to enhance or mitigate certain traits of animals under study (Teleken *et al.*, 2017; Fernandes *et al.*, 2019).

Commonly, studies of animal growth curves are performed using the longitudinal method, which seeks to monitor its evolution over time. However, some researchers have used the cross-sectional method, which uses similar animals at different times, for example, animals of the same breed raised in the same environment (Ribeiro *et al.* 2018; Souza *et al.*, 2019). The von Bertalanffy model is also used for plants growth, and in some cases, the cross-sectional data methodology is used when it is not possible to use longitudinal data, especially in dry matter and drying studies (Macedo *et al.*, 2017).

The use of the cross-sectional method is recommended to solve problems when the researcher does not have the time that the animal species under study takes to reach the end of the

growth phase. However, despite having some losses in the analysis such as loss of continuity when not following the same animal over time, which theoretically could result in increase in weight variability over the ages, this methodology brings the gain of rapid data collection. However, studies comparing methodologies using rabbit's data are still scarce.

Some researchers have already used the cross-sectional method as a substitute for the longitudinal method, as can be seen in the works by Ribeiro *et al.* (2018) and Souza *et al.* (2019) for 'Mangalarga Marchador' horses. Thus, for this type of growth curve analysis, comparing results using different methods is plausible, since the cross-sectional method may be a possible alternative for this type of study.

To validate the analysis, Popper (1972) proposed the application of the hypothetical deductive method, which states that in the construction and / or validation of a theory, one must seek a scientific hypothesis using tests to verify whether this hypothesis may or may not be validated. This non-exclusive theory is accepted in the scientific community and is known as conjectural science.

Given the above, the aim of this study was to evaluate the results of longitudinal and cross-sectional methodology using the von Bertalanffy's model in the description of the growth curve of crossbred rabbits.

## MATERIAL AND METHODS

Rabbits used in this experiment came from the didactic collection of the Rabbit Farming Sector of the Department of Zootechnics - Federal University of Lavras (DZO / UFLA), located in the municipality of Lavras, Minas Gerais, Brazil. Ten 'Gigante de Flandres' (GF) x 'Nova Zelândia Branco' (NZB) crossbred rabbits were evaluated, where GF is the paternal line and NZB the maternal line. Animals were weighted from birth to 150 days of age, and weights were collected on random days. The experiment was conducted between October 2017 and March 2018. The research project was previously submitted and authorized by the Ethics Committee in the use of animals of the Federal University of Lavras, under protocol number 022/17.

*Cross-sectional and longitudinal...*

Rabbits were weaned at 30 days of age and subsequently placed in groups of 5 animals per cage until 90 days of age, after which, they were rehoused in individual cages until the end of the experimental period. Cages are built with galvanized wire with dimensions of 80 cm in length x 60cm in width x 40cm in height. During the experimental period, rabbits received pelleted feed with 16% crude protein and free water distributed by nipple-type drinkers. Weighing of animals always took place in the morning before feeding, so that the weight was not influenced by food intake and was always measured by two people throughout the experiment.

The longitudinal method considered the mean value, in each age, of the weight of 10 crossbred rabbits divided into classes, for this method, the standard deviation of the weight of rabbits in each age class was also calculated. For the cross-sectional method, a random draw was carried out in which the individual weight of one rabbit in a given time  $t$  was used, simulating a situation in which the researcher arrives at the breeding site and measures the weights of several animals of different ages at the same time. Despite considering the weight of only one rabbit there is no loss of generalities since a random draw was carried out, so this unit value could also come from an average. Data can be seen in Table 1.

Table 1. Data on the weight of crossbred rabbits over time, with weight (average) in grams used in the longitudinal method and weight used in the cross-sectional method, identifying the number of the drawn rabbit

Class (Days)	Weight (average)	Standard deviation	Days ( $t$ )	Weight	Rabbit
0	57.33	4.8442	0	52	8
1-7	88.70	25.6540	4	92	10
8-14	178.10	40.5435	9	172	1
15-21	245.65	44.1018	17	170	5
22-28	309.55	64.1137	24	382	9
29-35	487.48	124.6204	30	478	2
36-42	719.10	155.3525	37	610	4
43-49	1019.80	181.3851	45	702	5
50-56	1335.90	188.6078	52	1180	7
57-63	1577.77	191.4398	59	1744	9
64-70	1906.35	171.4321	67	2104	10
71-77	2170.93	179.8482	75	2268	2
78-84	2400.08	198.4010	82	2423	1
85-91	2699.07	192.4267	89	2804	3
92-98	2826.07	208.3235	96	3116	4
					1
99-105	2988.25	233.8523	103	3228	
106-112	3128.45	226.5597	111	2848	6
113-119	3195.60	213.1326	119	2917	8
120-126	3261.90	205.5989	123	3230	10
127-133	3376.85	230.8545	129	3367	9
134-140	3423.15	194.5489	135	3494	1
141-147	3544.50	217.5053	145	3760	3
148-154	3594.50	215.9965	150	3650	7

Animal growth can be considered a result expressed by equation 1:

$$\frac{dP}{dt} = \alpha P^m + \beta P \quad (1)$$

where  $P$  represents the weight of the animal as a function of time  $t$ ;  $\alpha$  and  $\beta$  are anabolism and catabolism constants, respectively, and  $m$  is an exponent that indicates the last values proportional to some body weight power  $P$  (Bertalanffy, 1957; Fernandes et al., 2020).

The allometric coefficient  $m$  is directly linked to the pattern of animal development and the correct use of this value allows better estimates for the study of growth curves; therefore,  $m = 3/4$  was used, which was the most suitable for this type of study (Shi et al., 2014; Fernandes et al., 2019).

The parameterization used will be as follows:

$$y_i = a \left( 1 - \frac{\exp(k \times (b - x_i))}{4} \right)^4 + \varepsilon_i \quad (2)$$

for  $i = 1, 2, \dots, n$ , in which:  $y_i$  is the  $i$ -th observation of the dependent variable,  $x_i$  is the  $i$ -th observation of the independent variable;  $a$  is the asymptotic value, that is, the expected value for the maximum growth of the object under study, when  $x_i \rightarrow \infty$ ;  $b$  is associated with the abscissa of the inflection point;  $k$  is a maturity or precocity index associated with growth, and the higher its value, the less time it will take for the object under study to reach the asymptotic value  $a$ ;  $\varepsilon_i$  is the random error associated with the  $i$ -th observation which is assumed to be independent and identically distributed following a normal distribution of zero mean and constant variance, that is,  $\varepsilon_i \sim N(0, I\sigma^2)$ .

In the von Bertalanffy's model, the inflection or maximum point occurs at  $y_i = 8a/27 \approx 0,30a$ , indicating that it occurs at approximately 30% of the maximum horizontal asymptote value. To find the maximum point, the first derivative of the model was performed, and the 95% confidence interval (CI) was evaluated to verify whether there are significant differences between points found in each method.

The von Bertalanffy model was initially adjusted for each longitudinal and cross-sectional

methodology. The model parameters were estimated to describe the growth curves of crossbred rabbits. The estimates of these parameters were obtained by the Gauss-Newton iterative method implemented in the `nls()` function of the R software (R Core Team, 2020). The significance of parameters ( $\beta_i \neq 0$ ) was verified using the t test at 5% level ( $P < 0.05$ ). Initially, it was considered that all assumptions about errors ( $\varepsilon$ ) were met.

From the error vector of this adjustment, residual analysis was performed based on statistical tests using the Shapiro-Wilk (SW), Durbin-Watson (DW) and Breusch-Pagan (BP) statistical tests to verify normality, independence, and residual homoscedasticity, respectively. If any of the assumptions is not met, the deviation must be corrected or incorporated into the parameter estimation process.

If the DW test is significant ( $P < 0.05$ ) for the longitudinal method, a new adjustment will be made using the generalized least squares method, incorporating a first-order autoregressive parameter ( $\phi$ ) - AR (1) into the model. In this case, the error of model expression is given by:  $\varepsilon_i = \phi_1 \varepsilon_{i-1} + u_i$ . The verification of the independence assumption after the inclusion of the AR (1) will be done through graphical analysis.

The 95% confidence interval for the model parameter  $\beta_i$  is calculated as follows:

$$IC(\beta_i) : bi \pm t(v; 0.25) \times S(bi)$$

Where:  $bi$  is the estimate for the parameter ( $\beta_i$ );  $S(bi)$  is the standard error of the estimate and  $t(v; 0.25)$  is the upper quantile of the student's t distribution, considering  $\alpha = 5\%$  and the degree of freedom  $v = n - p$ .

The quality evaluators used were:

Determination coefficient:

$$R^2 = \left( 1 - \frac{SQR}{SQT} \right) \quad (3)$$

Standard error of the mean:

$$SEM = \left( \frac{\sigma}{\sqrt{n}} \right) \quad (4)$$

Residual standard error:

$$RSE = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (Y - \hat{Y})^2}{n-p}} \quad (5)$$

where:  $SQR$  is the square sum of residuals;  $SQT$  is the total square sum;  $n$  is the sample size;  $\sigma$  is sample standard deviation;  $\hat{Y}$  is the regressor variable estimated by the model;  $Y$  is the observed variable;  $p$  is the number of parameters. These evaluators were obtained using the following functions  $Rsq()$  in the R software. Thus, the most suitable model is the one that presents the highest  $R^2$  value and the lowest SEM value.

### RESULTS

When analyzing the results obtained by the Shapiro-Wilk (SW) and Breusch-Pagan (BP) tests considering 5% significance level, it was found that results were not significant ( $P > 0.05$ ), that is, the estimated model did not violate normality and homogeneity assumptions.

For the longitudinal methodology, residual dependence was assessed by the Durbin-Watson

test (DW) at 5% significance level. For the cross-sectional method, this assumption of residual dependence was not evaluated, since the observations are obtained from different animals and the weight of the rabbit at a given time  $t$  will not depend on the weight of the rabbit at the previous time  $t-1$ .

The DW test proved to be significant ( $P < 0.05$ ) for the longitudinal method, indicating that residues showed dependence; therefore, a new adjustment was made using the generalized least squares method, incorporating a first-order autoregressive parameter ( $\phi$ ) into the model - AR (1).

After the inclusion of AR (1), a new analysis of residues was performed to verify if the independence assumption was met. The graph of the partial autocorrelation function of adjustment residuals (Figure 1) demonstrated that only the first-order autoregressive parameter ( $\phi$ ) was sufficient to model the residual dependence, thus ensuring greater precision of estimates (Jane *et al.*, 2020).

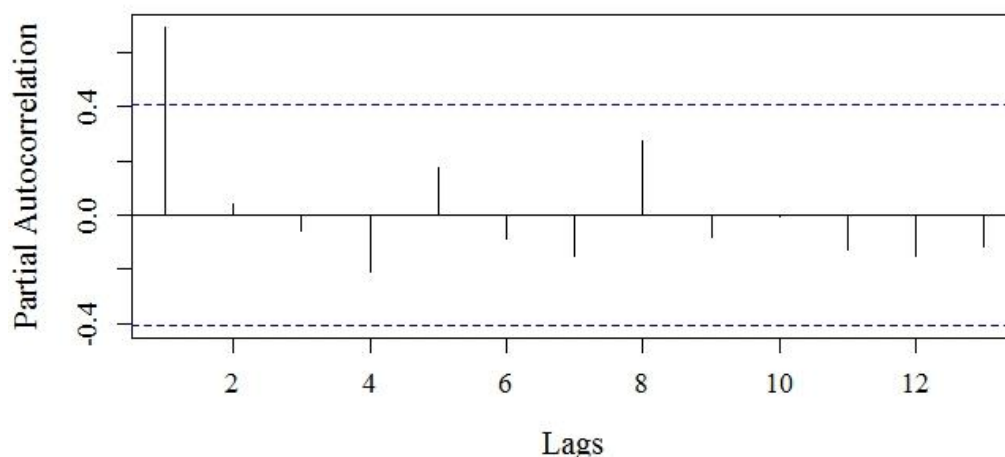


Figure 1. Graph of the partial autocorrelation function of residuals for the adjustment of the von Bertalanffy's model adjusted to the growth of crossbred rabbits using the longitudinal method.

The adjustments of methodologies under study using the von Bertalanffy's model all have significant parameters, by the test  $t$ , at 5%

significance for weight as a function of age and can be seen in Table 2.



Table 2. Estimates of parameters with respective 95% confidence intervals (CI) for the adjustment of the von Bertalanffy's model to the growth data of crossbred rabbits and the adjustment quality evaluators for each method under study

Method	Parameters	Estimate	CI	R <sup>2</sup>	SEM	RSE
Longitudinal	<i>a</i>	3809.4950	[3522.65; 4096.34]	0.9951	181.6349	109.96
	<i>b</i>	52.7677	[48.71; 56.82]			
	<i>k</i>	0.0274	[0.02; 0.03]			
	$\phi$	0.9217	[0.4333; 0.9916]			
Cross-sectional	<i>a</i>	3770.0000	[3481.30; 4198.42]	0.9852	212.0352	179.90
	<i>b</i>	50.1800	[46.32; 54.41]			
	<i>k</i>	0.0296	[0.02; 0.04]			

Determination coefficient values  $R^2$  were greater than 0.98, indicating satisfactory adjustments (Table 2). However, it was possible to observe greater residual standard error (RSE) in data when using the cross-sectional methodology in comparison with the longitudinal methodology, with values of 179.90 and 109.96 respectively (Table 2). Thus, it could be concluded that there is greater distance (variability) from values observed in relation to curve estimated using the

longitudinal method, this is corroborated when analyzing *SEM*.

In this study, it was observed that for both methodologies, the von Bertalanffy's model underestimated the weight of rabbits in the first 30 days of life, and values estimated by the longitudinal method showed slight superiority in relation to values estimated by the cross-sectional method (Figure 2).

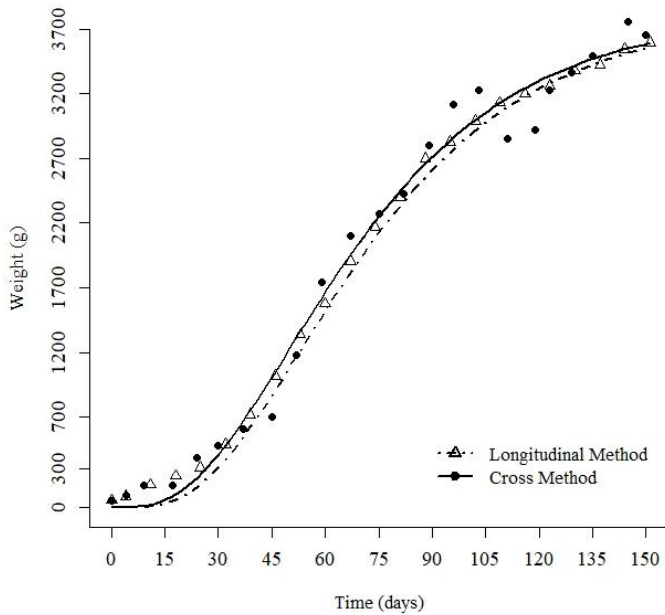


Figure 2. Growth curves observed using the von Bertalanffy's model using longitudinal and cross-sectional methods in crossbred rabbits.

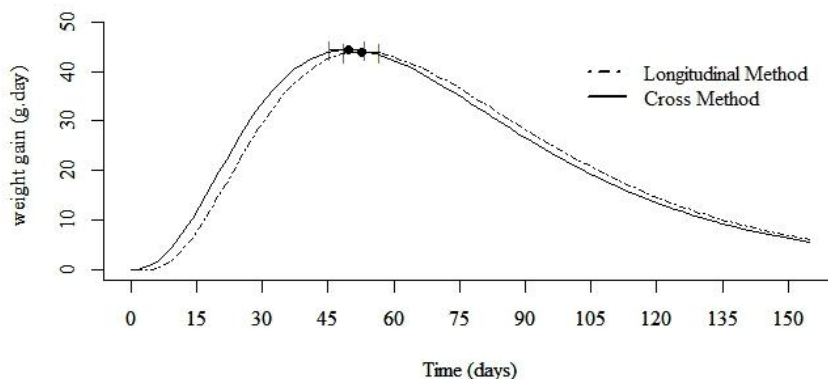


Figure 3. Graph of the daily growth rate in grams per day and the 95% CI for the maximum growth point using the cross-sectional and longitudinal method with von Bertalanffy's model for crossbred rabbits.

Figure 3 shows the point of maximum growth (inflection point), through the first derivative of the von Bertalanffy model, with the respective CI for both methods: longitudinal and cross-sectional.

### DISCUSSION

Adding a first-order autoregressive parameter ( $\phi$ ) to model residuals was necessary to model this autocorrelation and incorporate it into the model, so that data adjustments produce more accurate predictions and allow analyses of series measured in a few temporal observations, thus ensuring greater precision of estimates and better adjustment quality (Fernandes *et al.*, 2019). Silva *et al.* (2021b) mention in his paper that incorporating residual dependence does not necessarily improve the quality of fit, but it is the most coherent, since the assumption of residual independence was not met.

According to Table 2, through parameter a, the estimated value for the maximum weight of crossbred rabbits did not change significantly when the data collection methodology was changed, as there is an intersection in the confidence interval. Point estimates were 3,809.49 grams for the longitudinal methodology and 3770.00 grams for the cross-sectional methodology, in addition, to estimate values near in according with of rabbit's weights at 150 days age.

Weight gain control for this type of production is of paramount importance, as this performance index allows measuring the efficiency of the handling method used in rabbit breeding, consequently leading to improvement in carcass quality and yield (Sampaio *et al.*, 2003; Petrescu and Petrescu-Mag, 2018).

Rabbit has meat with excellent nutritional and dietary properties, with high nutritional value and easy digestibility, being recommended even for children and older adults (Migdal *et al.*, 2018; Hernández and Zotte, 2020). In rabbit farming, from the rearing of cubs, producers can increase profit margin according to the purpose and destination of production to be marketed. But, for this to occur adequately and for maximum return to be achieved, correct management of animals is required (Silva *et al.*, 2021a).

Several authors like Fradinho *et al.* (2016), Brunner *et al.* (2021) and Teixeira *et al.* (2021) showed in their studies the great utility of the parameters of nonlinear models possess practical or biological interpretation in animal growth analyses. Particularly, in the study by Teixeira *et al.* (2021) the cross-sectional data collection method was also used to describe the growth of Campolina horses. These authors claim that cross-sectional data collection together with the use of non-linear models proved to be efficient for the description of the animal growth curve.

Thus, a great advantage of the parameterization used in the von Bertalanffy's model is related to parameter *b*, since its estimates are directly interpreted as the abscissa of the inflection point, that is, the aforementioned parameter represents the maximum growth point, and after this moment, the animal continues to grow, but at a lesser pace, until it reaches adult weight (Fernandes *et al.*, 2019).

Therefore, for rabbits aged 45-60 days, their growth is more accentuated, and, after this period, it will reduce until reaching stabilization, it is observed that there is an intersection between the CIs of the inflection points (parameter *b*), indicating the suitability of the transversal method, which can also be seen in Figure 3. Possibly, the accentuated growth observed between the ages of 45 and 60 days is because animals already produce all the digestive enzymes necessary for the digestion and absorption of nutrients from diet and reduction of diarrhea and stress of starting a new life without the mother (Jaruche, 2013).

However, after 70 days of age, the growth of rabbits tends to reduce, since from that age, rabbits enter the puberty phase and their growth is slowed down (Ferreira *et al.*, 2012).

Jacob *et al.* (2015) evaluated 'Chinchila Soviética' and 'Gigante Branco' breeds and concluded that the von Bertalanffy's model described the average weekly growth of rabbits of both breeds, being effective for regulating regimes and feeding management to improve productivity and the overall profitability of rabbits.

The maximum growth point was evaluated for both methodologies using the first derivative of the model under study (Figure 3) and when evaluating CI, it was found that there were no significant differences ( $P < 0.05$ ) between points found in each method, since intervals have intersection. This indicates that on the 50<sup>th</sup> day of life (approximately), the greatest weight gain occurs and the data collection method did not influence this estimate. As in the study by Jacob *et al.* (2015), weight gain percentage decreased after the maximum growth point with increasing age.

Figure 3 shows that rabbits have greater weight gain when they are between 35 and 80 days old, with average daily weight gain (GMD) of approximately 40 g day<sup>-1</sup>. This result corroborates the studies available in the literature, being established that occurs slaughter of these animals between 75 and 80 days old. (Machado and Ferreira, 2011; Ferreira *et al.*, 2012; Jaruche, 2013).

According to results, the cross-sectional method, despite not being commonly used and presenting greater data variability in relation to the adjusted curve, proved to be a good alternative for describing the growth of crossbred rabbits. This method can be recommended when there is need for rapid assessment of animal growth to assist in nutrition and management.

Thus, using efficient techniques to describe the growth curve throughout the productive life of rabbits is fundamental in establishing the productive potential of a herd that can directly influence the final production results (Rebollar *et al.*, 2009; Szendro *et al.*, 2012). Aiming at commercial production, modern rabbit production seeks earlier, more prolific, productive, and resistant animals, so that they can be slaughtered earlier, with higher carcass yield, optimizing feeding costs (which corresponds to 70% of the total production cost), without violating environmental and animal welfare precepts (Ferreira *et al.*, 2012).

## CONCLUSION

The von Bertalanffy's model proved to be suitable for evaluating the growth of crossbred rabbits using both the longitudinal and cross-sectional methods. The longitudinal method presents better adjustment quality evaluators, since data show less variability of values observed with the adjusted curve. The cross-sectional method proved to be a good alternative for evaluating the growth of crossbred rabbits, and this type of analysis, in addition to saving time in data collection, provides model estimates and the maximum growth point statistically equal to the longitudinal method, with 95% confidence.

## ACKNOWLEDGEMENTS

To the "Conselho de Desenvolvimento Científico e Tecnológico" (CNPq), Brazil, for the scholarship granted to the first author.

## REFERENCES

- BERTALANFFY, L. Quantitative laws in metabolism and growth. *Q. Rev. Biol.*, v.32, p.217-231, 1957.
- BRUNNER N.; KUHLEITNER M.; RENNER-MARTIN K. Bertalanffy-Putter models for avian growth. *PLoS One*, v.16, p.e0250515, 2021.
- FERNANDES, F.A.; FERNANDES, T.J.; PEREIRA, A.A. *et al.* Growth curves of meat-producing mammals by von Bertalanffy's model. *Pesqui. Agropecu. Bras.*, v.54, p.1-8, 2019.
- FERNANDES, F.A.; SILVA, E.M.; LIMA, K.P. *et al.* Parameterizations of the von Bertalanffy model for description of growth curves. *Rev. Bras. Biometria*, v.38, p.369-384, 2020.
- FERREIRA, W.M.; MACHADO, L.C.; JARUCHE, Y.G. *et al.* *Manual prático de cunicultura*. Bambuí: Associação Científica Brasileira de Cunicultura, 2012. 75p.
- FRADINHO, M.J.; BESSA, R.J.B.; FERREIRA-DIAS, G.; CALDEIRA, R.M. Growth and development of the Lusitano horse managed on grazing systems. *Livest. Sci.*, v.186, p. 22-28, 2016.
- HERNÁNDEZ P.; ZOTTE A.D. Influence of diet on rabbit meat quality. In: DE BLAS, C.; WISEMAN, J. (Eds.). *Nutrition of the rabbits*. 3.ed. Wallingford: CABI Publishing, 2020. p.172-192.
- JACOB, N.; GANESAN, R.; SREEKUMAR D. Nonlinear growth model in rabbits. *Indian Vet. J.*, v.92, p.23-26, 2015.
- JANE, S.A.; FERNANDES, F.A.; SILVA, E.M. *et al.* Adjusting the growth curve of sugarcane varieties using nonlinear models. *Ciênc. Rural*, v.50, p.1-10, 2020. JARUCHE, Y.G. *Aprenda mais sobre os filhotes dos coelhos: os láparos*. Maringá, PR: Associação Científica Brasileira de Cunicultura, 2013. (Nota técnica). Available in: <http://acbc.org.br/site/images/stories/NT3.pdf>. Accessed: 10 Jul. 2021.
- KÜHLEITNER, M.; BRUNNER, N.; NOWAK, W.G. *et al.* Best-fitting growth curves of the von Bertalanffy-Pütter type. *Poult. Sci.*, v.98, p.3587-3592, 2019.
- LEE, L.; ATKINSON, D.; HIRST, A.G.; CORNELL, S.J. A new framework for growth curve fitting based on the von Bertalanffy Growth Function. *Sci. Rep.*, v.10, p.1-12, 2020.
- MACEDO, L.R.; CECON P.R.; SILVA F.F. *et al.* Bayesian inference for the fitting of dry matter accumulation curves in garlic plants. *Pesqui. Agropecu. Bras.*, v.52, p.572-581, 2017.
- MACHADO, L.C.; FERREIRA, W.M.A. *Cunicultura e o desenvolvimento sustentável*. 2011. Available in: <http://acbc.org.br/site/index.php/notas-tecnicas/a-cunicultura-e-o-desenvolvimento-sustentavel>. Accessed in: 10 Aug 2021.
- MARÍN-GARCÍA, P.J.; RÓDENAS, L.; MARTÍNEZ-PAREDES, E. *et al.* A moderate protein diet does not cover the requirements of growing rabbits with high growth rate. *Anim. Feed Sci. Technol.*, v.264, p.1-11, 2020.
- MIGDAL, L.; KOZIOL, K.; PALKA, S. *et al.* Mutations in leptin (LEP) gene are associated with carcass and meat quality traits in crossbred rabbits. *Anim. Biotechnol.*, v.29, p.153-159, 2018.
- MISCHAN, M.M.; PINHO, S.Z. *Modelos não lineares: funções assintóticas de crescimento*. São Paulo: Cultura Acadêmica, 2014. 184p.
- PETRESCU, D.C.; PETRESCU-MAG, R.M. Consumer behaviour related to rabbit meat as functional food. *World Rabbit Sci.*, v.26, p.321-333, 2018.
- POPPER, K.R. *A lógica da pesquisa científica*. São Paulo: Cultrix, 1972. 567p.
- R CORE TEAM. R: a language and environment for statistical computing. Vienna: R Foundation for Statistical Computing, 2020. Available in: <https://www.r-project.org/>. Accessed in: 23 Nov. 2020.
- REBOLLAR, P.G.; PÉREZ-CABALA, M.A.; PEREDA, N. *et al.* Effects of parity order and reproductive management on the efficiency of rabbit productive systems. *Livest. Sci.*, v.121, Suppl.2-3, p.227-233, 2009.

- RIBEIRO, R.A.; SOUZA, F.A.C.; MUNIZ, J.A. *et al.* Curva de crescimento em altura na cernelha de equinos da raça Mangalarga Marchador considerando-se heterocedasticidade. *Arq. Bras. Med. Vet. Zootec.*, v.70, p.272-278, 2018.
- SAMPAIO, I.B.M.; FERREIRA W.M.; BASTOS A.F. The use of a stochastic model of rabbit growth for culling. *World Rabbit Sci.*, v.13, p.107-112, 2003.
- SHI, P.J.; ISHIKAWA, T.; SANDHU, H.S. *et al.* On the 3/4-exponent von Bertalanffy equation for ontogenetic growth. *Ecol. Model.*, v.276, p.23-28, 2014.
- SILVA, M.A.J.G.; FERRAZ, P.F.P.; SANTOS L.M. *et al.* Effect of the spatial distribution of the temperature and humidity index in a New Zealand white rabbit house on respiratory frequency and ear surface temperature. *Animals*, v.11, p.1657, 2021a.
- SILVA, W.S.; FERNANDES, F.A.; MUNIZ, F.R. *et al.* Eucalyptus grandis x Eucalyptus urophylla growth curve in different site classifications, considering residual autocorrelation. *Rev. Bras. Biometria*, v.39, p.122-138, 2021b.
- SOUZA, F.A.C.; FERNANDES, T.J.; CUNHA, F.O. *et al.* Morphometric characteristics of the Mangalarga Marchador horse breed determined by nonlinear models. *Pesqui. Agropecu. Bras.*, v.54, p.1-10, 2019.
- SZENDRO, Z.; SZENDRŐ, K.; DALLE ZOTTE A. Management of reproduction on small, medium and large rabbit farms: a review. *Asian Austr. J. Anim. Sci.*, v.25, p.738-748, 2012.
- TEIXEIRA, G.L.; FERNANDES, T.J.; MUNIZ, J.A. *et al.* Growth curves of campolina horses using nonlinear models. *Livest. Sci.*, v.251, p.1-9, 2021.
- TELEKEN, J.T.; GALVÃO, A.C.; ROBAZZA, W.R. Comparing non-linear mathematical models to describe growth of different animals. *Acta Sci. Anim Sci*, v.39, p.73-81, 2017.

**ARTIGO 2****Using the von Bertalanffy model to describe ammonia volatilization from conventional and stabilized nitrogen fertilizers in coffee crop system**

Em avaliação na revista Communications in Soil Science and Plant Analysis

Norma do periódico (versão preliminar)

**ARTIGO 2****Using the von Bertalanffy model to describe ammonia volatilization from conventional and stabilized nitrogen fertilizers in coffee crop system**

FERNANDES F.A.<sup>1\*</sup>, SOUZA T.L.<sup>2</sup>, ALVES H.J.P.<sup>1</sup>, FERNANDES T.J.<sup>1</sup>, MUNIZ J.A.<sup>1</sup>,  
GUELF D.R.<sup>2</sup>

Department of Statistics<sup>1</sup> and Department of Soil Science<sup>2</sup>, Federal University of Lavras (UFLA),  
Lavras, Minas Gerais state, Brazil.

\*Autor correspondente: fernandesfelipe@gmail.com

**Abstract:** It has been increasingly important to control N-fertilizers, seeking high efficiency. This study aims to describe, using the von Bertalanffy model, the cumulative losses of nitrogen (N) by ammonia volatilization ( $N - NH_3$ ) from conventional and stabilized N-fertilizers applied in coffee orchard. The experiment was performed in Lavras municipality, Minas Gerais state, Brazil during the 2015/2016 coffee growing season. A randomized block design was used, with seven treatments (stabilized and conventional N-fertilizers) and three fertilizer applications. The evaluated stabilized and conventional N-fertilizers were: 1) prilled urea; 2) ammonium sulphate; 3) urea dissolved in water; 4) ammonium nitrate 5) urea + Cu + B; 6) urea + anionic polymer and; 7) urea + NBPT. Volatilization losses were evaluated, and the highest percentage of  $N - NH_3$  losses occurred with prilled urea and urea + anionic polymer, with losses greater than 30% of N-applied depending on the split. However, in the 2nd nitrogen fertilization, the von Bertalanffy model did not reach convergence for these treatments, which may have been influenced by the rainfall volume in the period. The lowest  $N - NH_3$  losses were found for ammonium nitrate and ammonium sulphate, with losses that did not exceed 0.6%. The parameters were all significant and had biological implications, and the results will contribute to the development of more efficient fertilizers technologies for farmers. The von Bertalanffy model was adequate to describe the cumulative loss of N by volatilization of ammonia from conventional and stabilized N-fertilizers for coffee crop areas.

Keywords: Agricultural systems; Effective parameters; heterogeneity; Soil models; Nutrient management

## Introduction

Brazil has the highest coffee production in the world, and this high volume reflects the great advances in the crop management, especially in the last 20 years, with significant increases in national average productivity since 2001. These increases have occurred because the Brazilian coffee crop systems has been expanding in areas of low-fertility soils; in some cases, the availability of water and especially nutrients is low, and the use of fertilizers for nutrient replacement is necessary (Martinez et al., 2020; CONAB, 2021; de Melo et al., 2022).

According to CONAB (2021), recent harvests in the coffee-growing area in Brazil have been reduced, but this change has been compensated by the productivity improvements represented by technological advancements in coffee production systems. Several factors affect the yield of coffee plants (*Coffea arabica* L.), among which nitrogen (N) nutrition is noteworthy; N deficiency severely limits crop yield since it is the nutrient needed in the greatest quantity between 200 to 500 kg ha<sup>-1</sup> year<sup>-1</sup>, in addition to being the 2nd most exported nutrient by the grains (Chagas et al., 2016; Martinez et al., 2020).

Fertility management are a smart way to improve agronomic efficiency of fertilizers and reduce their N losses, as these practices reduce production costs and environmental impacts (Keeler et al., 2016; Giannakis et al., 2019, Carrijo and Verhoeven, 2022). Increasing N use efficiency has been a major concern for decades, not only in coffee crops. Thus, extensive research has aimed to solve the threat of N loss in the form of ammonia from fertilizers (Dominghetti et al., 2016; Pijlman et al., 2020).

Although the main N-fertilizer used in global agriculture is urea (Guelfi-Silva, 2017; Sarkis et al., 2021), the efficiency of use of urea-N decreases greatly when applied inadequate edaphoclimatic conditions, and values between 20 and 40% of N applied have been reported in the scientific literature (Dominghetti et al., 2016; Souza et al., 2017; Santos et al., 2020).

Urea has some advantages, such as higher N concentration (45%) and solubility (1.0 to 1.2 kg L<sup>-1</sup>), lower corrosivity, and easier handling and application than other N-fertilizers (Ruark et al., 2018). When applying urea to the soil, the hydrolysis reaction causes an increase in pH in the region of application of fertilizer granules (Dominghetti et al., 2016). This alkalization results from the formation of bicarbonate ( $HCO_3^-$ ) and hydroxyl ( $OH^-$ ) ions and the absence of



protons ( $H^+$  ions) (Chagas et al., 2016), favoring the transformation of ammonium ( $N - NH_4^+$ ) into ammonia ( $N - NH_3$ ), which is a gas that is easily lost to the atmosphere (Cancellier et al., 2016).

To maintain coffee productivity and adequate N nutrition, it is necessary to study N-fertilizers to choose the one with the best agronomic efficiency and cost/benefit ratio. In this sense, there are several technologies on the market that can be used to provide N nutrition in coffee cultivation. Conventional fertilizers such as nitrate, ammonium sulphate and urea are used; regarding the latter, various technologies are aimed at increasing the efficiency of N-urea use.

The use of these technologies is important for improving the agronomic efficiency of N-fertilizers in coffee crop systems, and some studies have shown a related increase in efficiency (Dominghetti et al., 2016; Chagas et al., 2016; Sarkis et al., 2021). However, because the behavior of  $N - NH_3$  losses has not been determined, most published studies did not include a model that allows estimating, for example, the day when the maximum  $NH_3$  loss occurred and the length of time necessary for the occurrence of maximum loss.

According to studies on N-fertilizer technologies, the accumulation of  $NH_3$  losses over the evaluation time has a sigmoidal aspect. Nonlinear regression models can be used to represent the curve; such models present a adequate fit quality even when few parameters are used, and importantly, the estimates of their parameters have practical and/or biological implications (Archontoulis and Miguez, 2015, Sari et al., 2018). These models are used in many diverse areas of knowledge, especially in the study of curves describing growth of plants, decreases or lactation (Archontoulis and Miguez, 2015; Fernandes 2017; Arnal et al. 2018; Santos 2019; Jane 2020; Frühauf 2020).

There are several nonlinear models in the literature, including the Stanford & Smith, Cabrera and Juma models widely used in the description of carbon mineralization. Other examples are the Richards family models, including the logistic, Gompertz, Brody, and von Bertalanffy models, which are widely used for modeling growth curves (de Paula et al., 2020; Jane et al., 2020). Although the latter are typically used to describe sigmoidal growth curves, some of them are well suited for the description of phenomena accumulated over time, such as the cumulative losses of  $N - NH_3$ .

Assuming that the von Bertalanffy differential equation is a unifying structure for the study of growth models (Kühleitner et al. 2019), this model can provide adequate adjustments to describe the cumulative losses of  $N - NH_3$  during a certain time. It is also useful to verify the speed of these losses and the values at which they tends to zero.

Thus, the present scientific paper aimed to describe the cumulative  $NH_3$  losses due to volatilization from conventional and stabilized N-fertilizers applied to coffee crop system using the von Bertalanffy nonlinear model.

## **Materials and e Methods**

The experiment was conducted under field conditions in a dystrophic Red Latosol used for coffee cultivation in the Coffee Plantation Sector/Department of Agriculture/UFLA, Lavras municipality, Minas Gerais state, Brazil. The region where the experiment was conducted has a humid Cwb tropical climate with dry winters and temperate summers, according to the Köppen classification. The climate has two distinct seasons, the dry season, from May to September, and the rainy season, from October to April. The average annual temperature is 19.3 °C, with an average rainfall of 1493 millimeters (Souza et al. 2017).

### **Experimental design**

The experiment was conducted in a randomized block design with seven treatments and three replicates, totalizing 21 experimental units. Each plot consisted of 14 coffee plants spaced 0.6 m apart (8.4 m long) with 3.5 m between rows (3.5 m wide), totalizing a total plot size of 29.4 m<sup>2</sup>. As the useful area of the plot, the 10 central plants (6 m central) and 3 m width of the plot were considered, that is, a useful area of 18 m<sup>2</sup>. The treatments were as follows: 1) prilled urea (45% N), 2) ammonium sulphate (19% N and 24% S-SO<sub>4</sub><sup>2-</sup>), 3) urea dissolved in water, 4) ammonium nitrate (31% N), 5) urea treated with copper and boron (44% N; 0.4% B and 0.15% Cu), 6) urea + anionic polymer (41% N), and 7) urea treated with NBPT (45% N). These conventional fertilizer treatments were applied in the projection of the coffee canopy in three splits of 100 kg N ha<sup>-1</sup> year<sup>-1</sup> each.

### **Evaluation of $N - NH_3$ losses by volatilization**

The  $N - NH_3$  losses by volatilization were measured using a semiopen collector made of PVC with a diameter of 200 mm. Prior to the application of the N-fertilizers to the coffee crop, three PVC bases 20 cm in height were affixed to the soil in each experimental plot, with 15 cm remaining above the soil for the fitting of the collectors. The collectors were 50 cm high and had two internal supports to hold the sponges for capturing the volatilized  $N - NH_3$ . For N fertilization, the amount of N applied to the base of the collectors was calculated so that the loss of  $N - NH_3$  per hectare could be estimated later. Thus, immediately after N fertilization of the plot, as well as fertilization of the three bases, the collector was installed under one of the bases. Each collector contained 2 cm thick sponge disks with the same diameter as the collector (density =  $0.02 \text{ g cm}^{-3}$ ).

The foam disks were soaked with 80 ml of phosphoric acid solution ( $H_3PO_4$ ;  $60 \text{ ml L}^{-1}$ ) and glycerin ( $50 \text{ ml L}^{-1}$ ). The lower disk was placed inside the chamber at a height of 35 cm from the ground, and the upper disk was placed 20 cm above the lower disk. The lower disk was designed to capture the  $N - NH_3$  released by N-fertilizers, while the upper disk was placed to avoid contamination of the lower disk by  $N - NH_3$  released from the rest of the fertilized plot. A detailed scheme of the methodology used to estimate N volatilization, as well as the estimated cumulative loss, is described in Santos et al., 2020.

The evaluation of  $N - NH_3$  losses was performed at the 1st, 2nd, 3rd, 4th, 5th, 7th, 9th, 12th, 15th, 19th, 24th, and 31st days after application of the N-fertilizers during the 2015/2016 coffee growing season.

### Statistical analyses

The nonlinear von Bertalanffy model was adjusted for each treatment and fertilizer application. According to Fernandes et al. (2020), the most appropriate parameterization is:

$$y_i = a \left( 1 - \frac{\exp(k \times (b - x_i))}{3} \right)^3 + \varepsilon_i$$

em que  $y_i$  where represents the observed cumulative  $N - NH_3$  losses for  $i = 1, \dots, n$ ,  $x_i$  is the  $i$ -th observation of the cumulative losses of  $N - NH_3$ ,  $a$  represents the maximum horizontal asymptote, i.e., the highest percentage of N released by the fertilizer,  $k$  represents the growth index (the higher  $k$  is, the less time it takes to reach),  $b$  is the abscissa of the inflection point, from which growth decelerates, and  $\varepsilon_i$  corresponds to the random error, which is assumed to be independently

and identically distributed following a normal distribution with zero mean and constant variance; that is,  $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$  (Pinho, 2014).

In this model, the inflection point occurs at approximately one 3rd of the maximum volatilization of the asymptote.  $Y_i = a/3 = 0,33a$ , indicating that the inflection point estimated by the von Bertalanffy model occurs at 33.33% of the horizontal asymptote. According to Pinho (2014) and Fernandes et al. (2020), the parameters have practical or biological interpretation.

The von Bertalanffy model parameters (Eq. 1) were estimated using the least squares method by applying the iterative Gauss–Newton process, as reported in studies by Sari et al. (2018), Fernandes et al. (2020), Frühauf et al. (2020), Jane et al. (2020), among others, which applied parameterizations of the von Bertalanffy model in the growth of cedar and sugarcane varieties.

The significance of the parameters was verified by a t test at the 5% level, testing the following hypothesis: the estimates are equal to zero ( $\theta_i = 0$ ), that is, they do not contribute to the adjusted model. The residual analysis was performed using the Shapiro–Wilk, Breusch–Pagan and Durbin–Watson tests to verify the assumptions of normality, homogeneity of variances and independence of the residuals, respectively (Sari et al., 2018).

If residual dependence was found, the parameters were estimated by the generalized least squares method by incorporating the autoregressive parameter of order  $p$  into the residual, described by:

$$u_i = \phi_1 u_{i-1} + \dots + \phi_p u_{i-p} + \varepsilon_i$$

where  $i = 1, 2, \dots, n$  with  $n$  as the number of observations of cumulative losses of  $N - NH_3$ ;  $u_i$  is the adjustment residual for the  $i$ -th time;  $\phi_1$  is the autoregressive parameter of order 1;  $u_{i-1}$  is the residual time of adjustment immediately before the  $i$ th observation;  $\phi_p$  is the autoregressive parameter of order  $p$ ;  $u_{i-p}$  is the fit residual for  $p$  times before the  $i$ th observation; and  $\varepsilon_i$  is the white noise, with normal distribution  $N(0, I\sigma^2)$ . For the particular case of first-order autoregression (1),  $u_i = \phi_1 u_{i-1} + \varepsilon_i$  (Frühauf et al., 2020).

If the assumption of heterogeneity of variance was violated for the  $N - NH_3$  cumulative loss curves, the variance between the losses at each time  $i$  and the inverse of this variance calculated for the observations from the beginning to the time of stabilization were considered. In the adjustment

of these models, the inverse of the variances was used as a weighting factor by the *weight* option within the *nls* function of the statistical software R (R Core Team, 2018). If the assumption of normality was not satisfied, logarithmic or root transformations were performed to estimate new parameters, and if the problem was not solved, the Box–Cox transformation could be used (Box and Cox 1964). To assess the quality of fit of the model, the coefficient of determination ( $R^2$ ) was calculated:

$$R^2 = 1 - \frac{SSR}{SST}$$

where SSR is the sum of squares of the residuals and SST is the sum of squares total. It is worth noting that  $R^2$  indicates how much of the data variation was explained by the model.

All analyses were performed using specific routines and packages (*nls*, *nlme*, *car*, *lmtest*, *qqpcR* e *Rsq*) of R software (R Core Team, 2018).

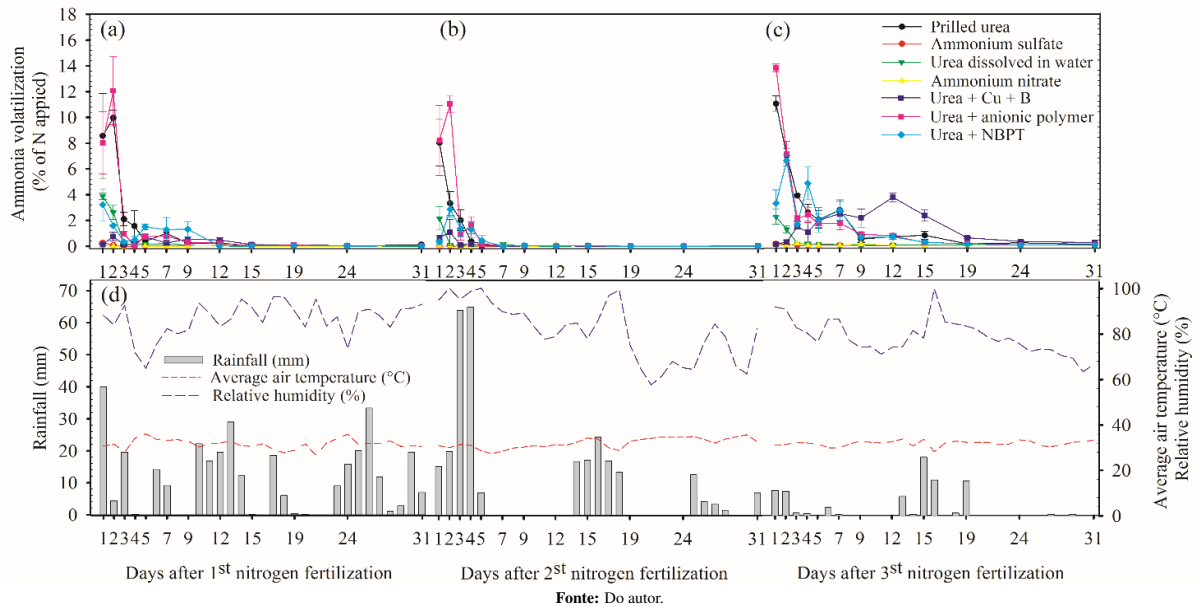
## Results e Discussion

Figure 2.3 shows the daily NH<sub>3</sub> losses in the 2015/2016 harvest for the three splits (a, b and c) over 31 days after each fertilizer application and the climatic data (d) for the application of conventional and stabilized N-fertilizers.

The daily volatilization is represented as the percentage volatilized from the total amount applied, which was 100 kg of N ha<sup>-1</sup> year<sup>-1</sup> in each application. Thus, the more distant the first peaks of volatilization are from the day of the first application, the better the probability to incorporation of urea into soil by rainfall.

As shown in Figure 2.3, rainfall of approximately 40 mm, 18 mm and 8 mm occurred in the 1<sup>st</sup>, 2<sup>nd</sup> and 3<sup>rd</sup> N-split, respectively, on the 1st day after fertilization. In the 2<sup>nd</sup> split, there was a higher volume of rain in the first 5 days, while in the 3<sup>rd</sup> split, a lower volume of rain was observed throughout the study period. The temperature was also relatively constant within a range of approximately 20 to 30°C. According to Souza et al. (2017) and Carrijo and Verhoeven (2022) the intensity of the daily loss of N – NH<sub>3</sub> is influenced by several factors related to the soil and climate of the area, such as soil temperature and humidity, rainfall, relative humidity, and wind speed.

Figura 3.1 – Daily losses of  $\text{NH}_3\text{-N}$  by volatilization in the 1<sup>st</sup>, 2<sup>nd</sup> and 3<sup>rd</sup> N-splitting, respectively (a, b and c) of conventional and stabilized nitrogen fertilizers and climatic conditions (d) of the 2015/2016 coffee growing season.



The von Bertalanffy model was adjusted for the cumulative losses of  $N - \text{NH}_3$ . After fitting the model, considering that all assumptions about the error vector were accepted, that is, the residuals are independent and identically distributed following a normal distribution with zero mean and constant variance  $\varepsilon \sim N(0, \sigma^2)$ , a residual analysis was performed based on the following statistical tests: Shapiro–Wilk, Durbin-Watson and Breusch–Pagan.

Considering a significance level of 5%, for the 1<sup>st</sup> split, the urea + anionic polymer did not satisfy the assumption of independence of the residuals. Therefore, a new fit was performed by the generalized least squares method by incorporating the first-order autoregressive parameter (AR1) into the model because in the presence of autocorrelated errors, it is important to model this autocorrelation and incorporate it into the model to improve the precision of the estimates and quality of the fit (Pinho et al., 2014, Archontoulis and Miguez, 2015; Sari et al., 2019).

According to Pino (2014), nonnormality occurs when any of the variables describing a phenomenon follows any probability distribution other than normal for reasons intrinsic to the phenomenon. In the 2<sup>nd</sup> split, the residuals for the treatments urea + Cu + B and urea + anionic polymer did not follow a normal distribution. Thus, the abovementioned techniques were used to

remedy this violation of the assumptions; however, no cited technique solved this problem. In this same fertilizer split, the assumption of homogeneity of variances for the vector of residuals was not met for the treatment of prilled urea, so in this case, an adjustment was attempted by weighting the variance by its inverse; however, even with this approach, homogeneity was not achieved. Thus, the estimates of the parameters in these treatments will not be presented.

Table 2.1 shows the estimates of the parameters of the von Bertalanffy model in the adjustments of the cumulative losses of  $N - NH_3$  for the three splits of the 2015/2016 coffee growing season, with their corresponding standard error (SE) and coefficient of determination ( $R^2$ ) values. With the exception of parameter b of the 3<sup>rd</sup> split for the treatment of urea + anionic polymer, all parameters were significant at a probability of 5%, demonstrating that the proposed and adjusted model can be used to make predictions.

The estimates of parameter b for the 1<sup>st</sup> split indicate that only for the ammonium nitrate and urea + Cu + B treatments did the maximum loss of  $N - NH_3$  occur after the 3<sup>rd</sup> day. For the other treatments, the model shows that the loss of  $N - NH_3$  decreased after the 1<sup>st</sup> day until it stabilized. The estimates of parameter b for the 2<sup>nd</sup> split show that ammonium nitrate had a maximum loss of  $N - NH_3$  after the 3<sup>rd</sup> day, similar to the 1<sup>st</sup> split. For ammonium sulphate, the maximum  $NH_3$  loss occurred after the 2<sup>nd</sup> day, and for the urea + NBPT, it occurred after the 1<sup>st</sup> day. In the 3<sup>rd</sup> split, a greater delay (in days) was observed for the occurrence of the maximum loss of  $N - NH_3$  in the ammonium nitrate and urea + Cu + B treatments, occurring after the 4<sup>th</sup> and 5<sup>th</sup> days, respectively.

The higher  $k$  is, the faster the loss of  $N - NH_3$  occurs, which is directly related to the amount of rainfall. When the rainfall volume is higher, volatilization is lower, so greater absorption by the root system occurs and there is a higher N content in the root layers of plants; plant has better N absorption. Note that the values of  $k$  were lower in the 3<sup>rd</sup> split than in the other installments, which is due to the low volume of rainfall that occurred in this period.

According to Klimczyk et al. (2021) a problematic issue in agriculture is the high amount of ammonia released, resulting in a partial loss of nitrogen contained in urea fertilizers. Thus, it is very useful to use modeling to describe ammonia volatilization through a model such as von Bertalanffy's, in which the parameters have a practical interpretation.

Tabela 3.1 – Estimates with standard error (SE) of the percentage of  $N - NH_3$  volatilization of nitrogen fertilizers (stabilized and conventional) in coffee crops using the von Bertalanffy model and the corresponding coefficients of determination ( $R^2$ ).

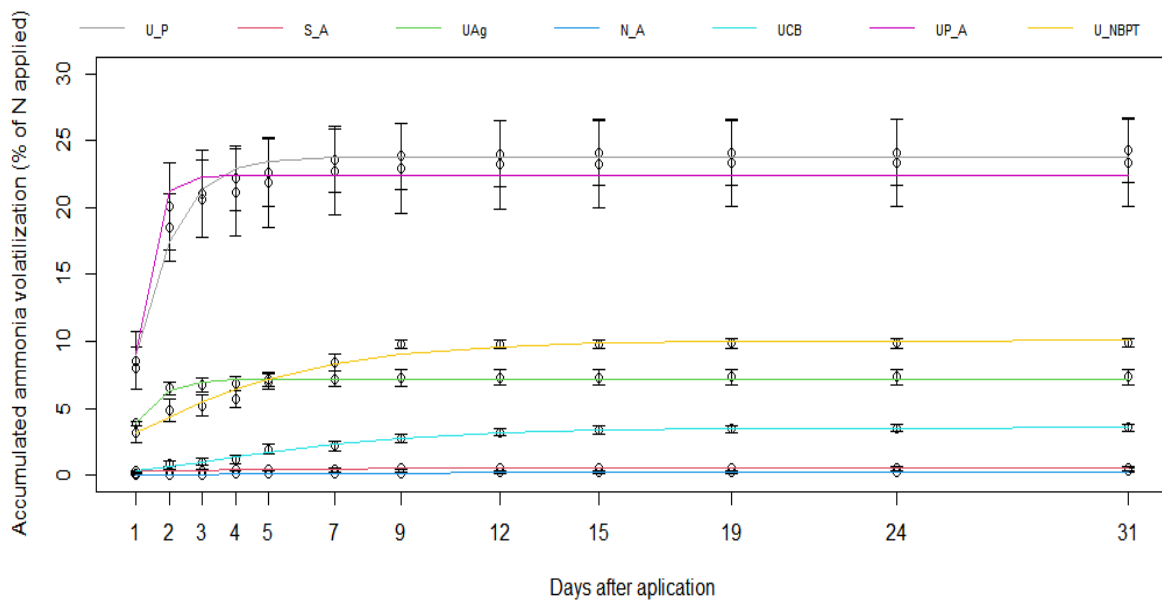
	Prilled urea		Ammonium sulphate		Urea dissolved in water		Ammonium nitrate		Urea + Cu + B		Urea + anionic polymer		Urea + NBPT	
	Estimate	SE	Estimate	SE	Estimate	SE	Estimate	SE	Estimate	SE	Estimate	SE	Estimate	SE
P1														
a	23.7784	0.2331	0.57858	0.01058	7.2087	0.0651	0.2713	0.0171	3.54938	0.0888	22.3531	1.0224	10.0568	0.2113
b	0.8258	0.0689	-2.28042	0.584	0.5772	0.0918	3.62399	0.53677	3.1044	0.2039	0.9072	0.0271	0.8833	0.2529
k	1.0361	0.1036	0.17461	0.02279	1.40952	0.2155	0.15925	0.0326	0.23709	0.0239	2.7109	0.3767	0.279	0.0339
$\phi$	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	0.9365	-	-	-
$R^2$	0.9823		0.9784		0.9678		0.9539		0.9872		0.9682		0.9778	
P2														
a	-	-	0.0607	0.0051	2.4518	0.0161	0.2144	0.0104	-	-	-	-	6.3686	0.0532
b	-	-	2.4652	0.7208	-8.0545	1.9324	3.4159	0.3666	-	-	-	-	1.5885	0.0469
k	-	-	0.1023	0.0244	0.2235	0.0451	0.3225	0.072	-	-	-	-	0.962	0.058
$R^2$	-	-	0.953		0.9437		0.9528		-	-	-	-	0.9949	
P3														
a	30.9651	0.2242	0.3555	0.0517	3.8105	0.0289	0.2838	0.0229	16.9459	0.2873	30.5174	0.2557	22.5265	0.2805
b	0.5856	0.0901	-0.7582	1.6826	0.312	0.1182	4.7644	0.6848	5.4181	0.1435	0.0349*	0.1478	1.6185	0.0952
k	0.4356	0.0235	0.0447	0.0129	1.0742	0.1351	0.1875	0.0496	0.2075	0.0121	0.4396	0.0331	0.4657	0.0336
$R^2$	0.9947		0.9779		0.974		0.9341		0.9969		0.9895		0.9914	

\*\*nonsignificant at 1% and 5% \*nonsignificant at 5%



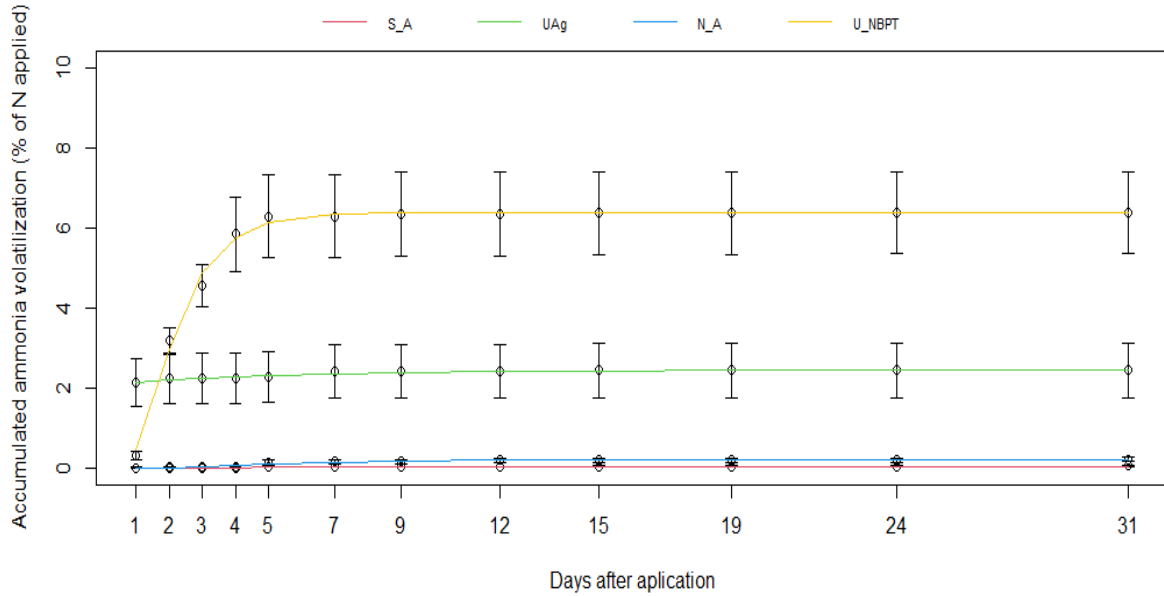
Figures 2.4, 2.5 and 2.6 present the cumulative losses of  $N - NH_3$  by volatilization in the 1<sup>st</sup>, 2<sup>nd</sup> and 3<sup>rd</sup> split of conventional and stabilized N-fertilizers application in the 2015/2016 coffee growing season. The treatments considered were: prilled urea (PU), ammonium sulphate (AS), urea dissolved in water (UW), ammonium nitrate (AN), urea treated with copper and boron (UCB), 6 urea + anionic polymer (UAP) and urea treated with NBPT (UNBPT).

Figura 3.2 – Cumulative losses of  $N - NH_3$  by volatilization in the 1<sup>st</sup> split of conventional and stabilized nitrogen fertilizer application in the 2015/2016 coffee growing season.



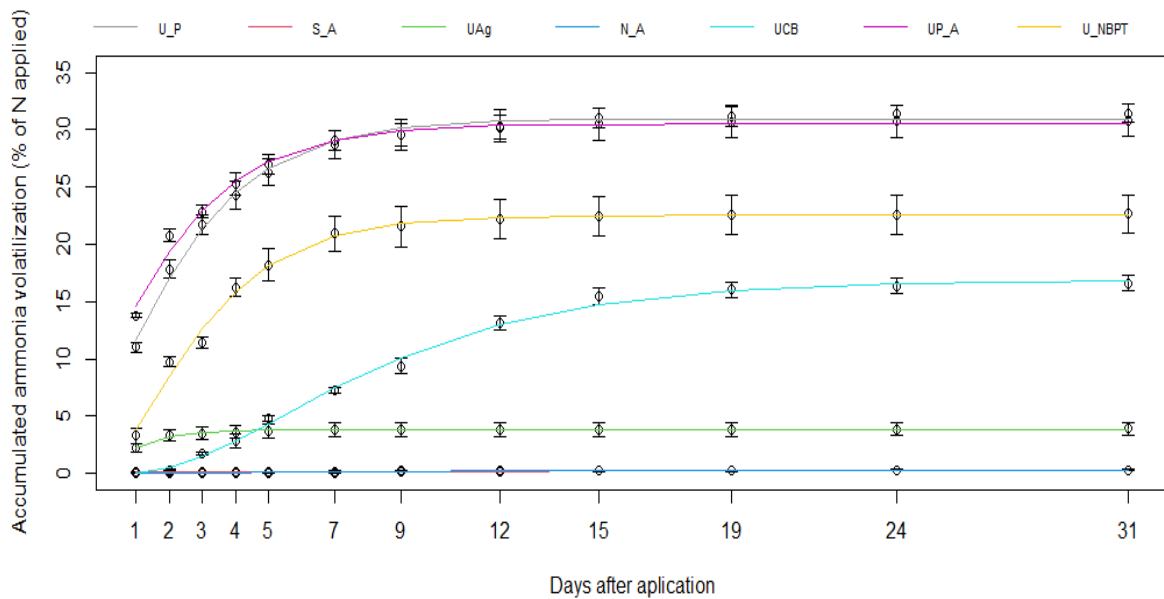
Fonte: Do autor.

Figura 3.3 – Cumulative losses of  $N - NH_3$  by volatilization in the 2<sup>nd</sup> split of conventional and stabilized nitrogen fertilizer application in the 2015/2016 coffee growing season.



Fonte: Do autor.

Figura 3.4 – Cumulative losses of  $N - NH_3$  by volatilization in the 3<sup>rd</sup> split of conventional and stabilized nitrogen fertilizer application in the 2015/2016 coffee growing season.



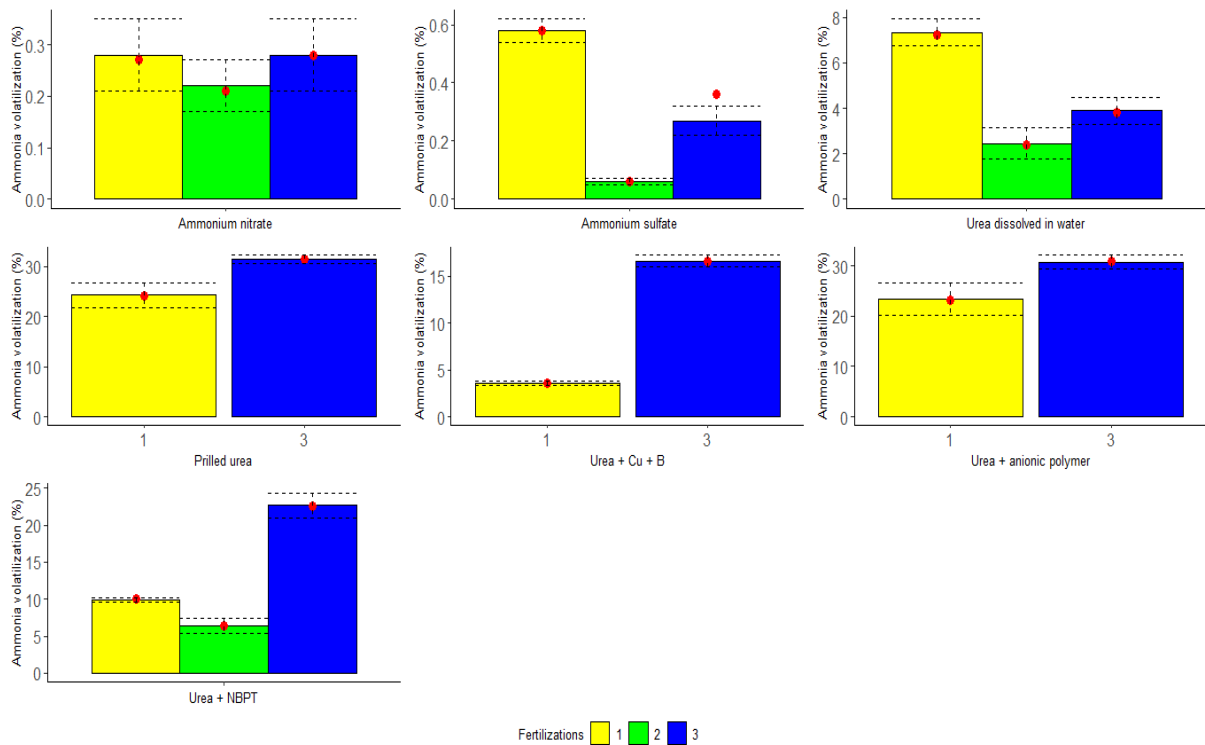
Fonte: Do autor.

The highest cumulative  $NH_3$  losses occurred for prilled urea and urea + anionic polymer in the 1<sup>st</sup> and 3<sup>rd</sup> N-splitting, with values varying between approximately 23 and 31%. In the 2<sup>nd</sup> split, problems arose in the validation of the von Bertalanffy model for the prilled urea, urea + Cu + B and urea + anionic polymer treatments; thus, the greatest cumulative loss was obtained for urea + NBPT. In the 3<sup>rd</sup> split, when there was less rainfall, the cumulative loss of urea + Cu + B was higher than that of urea dissolved in water, unlike the 1<sup>st</sup> split.

In the literature, there are other studies that have presented results on the accumulated losses of N by volatilization of ammonia from conventional and stabilized N-fertilizers (Souza et al. 2017; Andrade et al., 2021), however, no studies were found that model these losses of N through of nonlinear models.

Figure 2.7 shows that the parameters that represent the asymptotic stabilization of the cumulative  $N - NH_3$  losses have reliable estimates because they are within the 95% confidence interval of the experimental values, except for the 3<sup>rd</sup> split of the ammonium sulphate.

Figura 3.5 – Representation of estimates of the parameter  $a$  (red dots) of the von Bertalanffy model for conventional and stabilized nitrogen fertilizers and climatic conditions of the 2015/2016 coffee growing season.



For the prilled urea, ammonium nitrate, urea + Cu + B, urea + anionic polymer and urea + NBPT, there was greater cumulative loss of  $N - NH_3$  in the 3<sup>rd</sup> split; i.e., there was a lower rainfall volume. Only in the treatments of ammonium sulphate and urea dissolved in water did the greatest loss of  $N - NH_3$  not occur in the 3<sup>rd</sup> split, indicating that these treatments are suitable for drought periods.

The fit of the von Bertalanffy nonlinear regression model showed the estimates of the parameters, which have practical or biological implications, as seen in Lúcio et al. (2016) in a study of the growth of the average weight of cherry tomatoes. In this study, the model was also shown to be adequate, with coefficients of determination greater than 93% for all scenarios. The model results also provide additional information that will assist producers in the management and selection of more appropriate N-fertilizers for coffee crop management.

## **Conclusion**

The von Bertalanffy model was adequate for the description of  $NH_3$  losses by volatilization from conventional and stabilized N-fertilizers applied in coffee crop systems. The model parameters provided relevant information about the phenomenon studied, especially  $a$ , which showed the maximum value (in %) of ammonia volatilization for each treatment. Furthermore, by means of  $b$ , the day of maximum loss of  $NH_3$  could be verified. For example, for the treatment of urea + Cu + B, the model converged after the 3<sup>rd</sup> day for two N fertilization splitting.

The highest percentage of  $NH_3$  losses occurred with prilled urea and urea + anionic polymer, with values greater than 30% of N-applied depending on the split. However, the use of the nonlinear model was not appropriate for some treatments in splits with large rainfall volumes. The lowest N losses by volatilization were found for ammonium nitrate and ammonium sulphate, with losses that did not exceed 0.6%.

## **Conflict of interest**

No potential conflict of interest was reported by the authors.

## **References**

Andrade, A. B., Guelfi, D. R., Chagas, W. F. T., Cancellier, E. L., Souza, T. L., Oliveira, L.S.S., Faquin, V. and Du C. 2021. Fertilizing maize croppings with blends of slow/controlled-release and conventional nitrogen fertilizers. *Journal of Plant Nutrition and Soil Science*, 184(2), 227-237. <https://doi.org/10.1002/jpln.201900609>

Archontoulis, S. V. and Miguez, F. E. 2015. Nonlinear Regression Models and Applications in Agricultural Research. *Agronomy Journal*. 107(2), 786-798. <https://doi.org/10.2134/agronj2012.0506>

Arnal, M., Robert-Granie, C. and Larroque, H. 2018. Diversity of dairy goat lactation curves in France. *Journal of dairy science*. 101(12): 11040-11051. <https://doi.org/10.3168/jds.2018-14980>.

Box, G. E. and Cox, D. R. 1964. An analysis of transformations. *Journal of the Royal Statistical Society: Series B (Methodological)*, 26(2):211-243. <https://doi.org/10.1111/j.2517-6161.1964.tb00553.x>

Cancellier, E. L., Silva, D. R. G., Faquin, V., Almeida, B. A., Cancellier, L. L. and Spehar, C. R. 2016. Ammonia volatilization from enhanced efficiency urea on no-till corn in Brazilian cerrado with improved soil fertility. *Science and Agrotechnology*. 40, 15–23. <http://dx.doi.org/10.1590/1413-70542016402031115>.

Carrijo, D.R. and Verhoeven, E. 2022. Fate of nitrogen (<sup>15</sup>N) fertilizer in tall fescue seed systems at different applicaton timings. *Agronomy Journal*, 114 (2), 1040-1051. <https://doi.org/10.1002/agj2.21027>

Chagas, W. F. T., Guelfi, D. R., Caputo, A. L. C., Souza, T. L. D., Andrade, A. B. and Faquin, V. 2016. Ammonia volatilization from blends with stabilized and controlled-released urea in the coffee system. *Science and Agrotechnology*. 40:497-509. <https://doi.org/10.1590/1413-70542016405008916>

CONAB CNA. 2021. Acompanhamento da safra brasileira de café safra 2021. Terceiro levantamento, Brasília, 8(3):1-58. de Paula, G. S, Silva, E. M., Frühauf, A. C., da Silva, É. M., Muniz, J. A. and Fernandes, T. J. 2020. Modeling the amount of mineralized carbon from swine manure and wheat straw. *Revista Agrogeoambiental*, 12(3). <http://dx.doi.org/10.18406/2316-1817v12n320201466>

de Melo, G. A., Torres, J. L. R., Silva, A. D. A., Fernandes, A. L. T., Carvalho, F. J., Loss, A., and Lemes, E. M. 2022. Soil Chemical Attributes, Nutrient Levels, and Yield of Arabica Coffee under Limestone Managements. *Communications in Soil Science and Plant Analysis*, 1644-1654. <https://doi.org/10.1080/00103624.2022.2063312>

Dominghetti, A. W., Guelfi, D. R., Guimarães, R. J., Caputo, A. L. C., Spehar, C. R. and Faquin, V. 2016. Nitrogen loss by volatilization of nitrogen fertilizers applied to coffee orchard. *Science and Agrotechnology*. 40:173-183. <https://doi.org/10.1590/1413-70542016402029615>

- Fernandes, T. J., Pereira, A. A. and Muniz, J. A. 2017. Double sigmoidal models describing the growth of coffee berries. *Ciência Rural*. 47. <https://doi.org/10.1590/0103-8478cr20160646>
- Fernandes, F. A., Silva, É. M., Lima, K. P., Jane, S. A., Fernandes, T. J. and Muniz, J. A. 2020. Parameterizations of the von Bertalanffy model for description of growth curves. *Brazilian Journal of Biometrics*. 38(3):369-384. <https://doi.org/10.28951/rbb.v38i3.457>
- Frühauf, A. C., de Assis Pereira, G., Barbosa, A. C. M. C., Fernandes, T. J. and Muniz, J. A. 2020. Nonlinear models in the study of the cedar diametric growth in a seasonally dry tropical forest. *Brazilian Journal of Agricultural Sciences*. 15(4):1-8. <https://doi.org/10.5039/agraria.v15i4a8558>
- Giannakis, E., Kushta, J., Bruggeman, A. and Lelieveld, J. 2019. Costs and benefits of agricultural ammonia emission abatement options for compliance with European air quality regulations. *Environ Sci Eur* 31(93). <https://doi.org/10.1186/s12302-019-0275-0>
- Guelfi-Silva, D. R. 2017. Fertilizantes nitrogenados estabilizados, de liberação lenta ou controlada. *International Plant Nutrition Institute – Brasil*. Informações Agronômicas, Piracicaba. 1–14. ISSN 2311-5904
- Jane, S. A., Fernandes, F. A., Muniz, J. A. and Fernandes, T. J. 2020. Nonlinear models to describe height and diameter of sugarcane RB92579 variety. *Revista Ciência Agronômica*. 51. <https://doi.org/10.5935/1806-6690.20200062>
- Keeler, B. L., Gourevitch, J. D., Polasky, S., Isabel, F., Tessum, C. W., Hill, J. D. and Marshall, J.D. 2016. The social costs of nitrogen. *Science advances*. 2(10): e1600219. [10.1126/sciadv.1600219](https://doi.org/10.1126/sciadv.1600219)
- Kühleitner, M., Brunner, N., Nowak, W. G., Renner-Martin, K. and Scheicher, K. 2019. Best-fitting growth curves of the von Bertalanffy-Pütter type. *Poultry science*. 98(9):3587-3592. <https://doi.org/10.3382/ps/pez122>
- Lúcio, A. D. C., Sari, B. G., Rodrigues, M., Bevilaqua, L.M., Voss, H. M. G., Copetti, D. and Faé, M. 2015. Nonlinear models for estimating cherry tomato yield. *Ciência Rural*, 46, 233-241. <https://doi.org/10.1590/0103-8478cr20150067>
- Martinez, H. E. P., de Souza, B. P., Caixeta, E. T., de Carvalho, F. P. and Clemente, J. M. 2020. Water deficit changes nitrate uptake and expression of some nitrogen related genes in coffee-plants (*Coffea arabica* L.). *Scientia Horticulturae*, 267:109254. <https://doi.org/10.1016/j.scienta.2020.109254>
- Pijlman, J., Berger, S. J., Lexmond, F., Bloem, J., van Groenigen, J. W., Visser, E. J., Erisman, J. W. and van Eekeren, N. 2020. Can the presence of plantain (*Plantago lanceolata* L.) improve nitrogen cycling of dairy grassland systems on peat soils?. *New Zealand Journal of Agricultural Research*. 63(1):106-122. <https://doi.org/10.1080/00288233.2019.1698620>

- Pinho, S. Z. D., Carvalho, L. R. D, Mischán, M. M. and Passos, J. R. D.S. 2014. Critical points on growth curves in autoregressive and mixed models. *Scientia Agricola*. 71(1):30-37. <https://doi.org/10.1590/S0103-90162014000100004>
- Pino, F. A. 2014. A questão da não normalidade: Uma revisão. *Revista de economia agrícola*. 61(2):17-33.
- R Core Team. R: A language and environment for statistical computing. Vienna: R Foundation for Statistical Computing, 2020. <https://www.r-project.org>. 04 Mar. 2021
- Ruark, M. D., Soratto, R. P. and Rosen, C. J. 2018. Merits and limitations of enhanced efficiency fertilizers. In: Lal R, Stewart BA (Ed.). In Soil nitrogen uses and environmental impacts. 289-314. CRC Press. (Advances in Soil Science).
- Santos, A. L. P., Moreira, G. R., Gomes-Silva, F., Brito, C. C. R. D., Costa, M. L. L., Pereira, L. G. R., Maurício, R. M., Azevêdo, J. A. G., Pereira, J. M., Ferreira, A. L. and Filho, M. C. 2019. Generation of models from existing models composition: An application to agrarian sciences. *PLoS one*. 14(12):e0214778. <https://doi.org/10.1371/journal.pone.0214778>
- Santos, C. F., da Silva Aragao, O. O., Silva, D. R. G., da Conceição Jesus, E., Chagas, W. F. T., Correia, P. S. and de Souza Moreira, F.M. 2020. Environmentally friendly urea produced from the association of N-(n-butyl) thiophosphoric triamide with biodegradable polymer coating obtained from a soybean processing byproduct. *Journal of Cleaner Production*. 276:123014. <https://doi.org/10.1016/j.jclepro.2020.123014>
- Sari, B. G., Lúcio, A. D. C., Santana, C. S., Olivoto, T., Diel, M. I. and Krysczun, D. K. 2019. Nonlinear growth models: An alternative to ANOVA in tomato trials evaluation. *European Journal of Agronomy*. 104:21-36. <https://doi.org/10.1016/j.eja.2018.12.012>
- Sari, B. G., Olivoto, T., Diel, M. I., Krysczun, D. K., Lúcio, A. D. and Savian, T. V. 2018. Nonlinear modeling for analyzing data from multiple harvest crops. *Agronomy Journal*, 110(6), 2331-2342. <https://doi.org/10.2134/agronj2018.05.0307>
- Sarkis, L. F., Andrade, A. B., Guelfi, D., Chagas, W. F. T., Faquin, V., & Guareschi, R. F. 2021. Carbon Dioxide Flux of Conventional and Slow or Controlled Release Nitrogen Fertilizers in Coffee Crop. *Communications in Soil Science and Plant Analysis*, 52(22), 2884-2897. <https://doi.org/10.1080/00103624.2021.1971690>
- Souza, T. L. D., Guelfi, D. R., Silva, A. L., Andrade, A. B., Chagas, W. F. T. and Cancellier, E. L. 2017. Ammonia and carbon dioxide emissions by stabilized conventional nitrogen fertilizers and controlled release in corn crop. *Science and Agrotechnology*. 41:494-510. <https://doi.org/10.1590/1413-70542017415003917>

**ARTIGO 3****Non-linear quantile regression for a scenario of lack of normality of residuals**

Norma NBR 6022 (ABNT 2018)



**ARTIGO 3****Non-linear quantile regression for a scenario of lack of normality of residuals**FERNANDES F.A.<sup>1\*</sup>, SANTOS, C. F.<sup>2</sup>, FERNANDES T.J.<sup>1</sup>, GUELF D.R.<sup>2</sup>

Departamento de Estatística<sup>1</sup> e Departamento de Ciência do Solo<sup>2</sup>, Universidade Federal de Lavras (UFLA), Campus, Avenida Doutor Sylvio Menicucci, n° 1.001, Caixa Postal 3037, CEP 37200-900, Lavras, MG, Brasil.

\*Corresponding author: fernandesfelipe@gmail.com

**Abstract** The fit of non-linear models eventually violates the assumptions of the model residuals, in which the lack of normality is one of the most complicated problems to overcome. Quantile regression is an alternative to circumvent these problems in the residual vector, thus allowing the adjustment of data for each observation. Non-linear models describe well several phenomena of nature, among them, the cumulative losses of ammonia ( $N - NH_3$ ) by volatilization from nitrogen fertilizers. Nitrogen fertilization is one of the most studied agricultural practices in cropping systems. Among nitrogen fertilizers, urea is the most used source applied to coffee crops due to its lower cost per N unit compared to ammonium sulfate and ammonium nitrate. However, urea is prone to significant losses by volatilization of  $N - NH_3$ . The goal of the present study was to use quantile regression to fit the non-linear von Bertalanffy model when the residual vector shows a lack of normality, to describe the cumulative losses of N by ammonia volatilization in fertilizers applied to coffee plants. The experiment was evaluated in Lavras, state of Minas Gerais, in the 2015/2016 growing season. A randomized block design was used, with 03 treatments and one split. The evaluated conventional and enhanced efficiency fertilizers were: Prilled Urea, Urea + Cu + B, Urea + Anionic Polymer. Losses by volatilization were evaluated, with the highest N losses in percentage occurring in Prilled Urea and Urea + Anionic Polymer. The non-linear quantile regression proved to be adequate to describe cumulative losses of  $N - NH_3$  by volatilization for the treatments of Prilled Urea, Urea + Cu + B and Urea + Anionic Polymer of the 2015/2016 season, with a median ( $\tau = 0.50$ ) in some cases equivalent to the adjustment to the mean.

**Key words:** *Coffea arabica L.*, urease inhibitors, modeling.

## Introduction

As they describe the most diverse situations, present a good quality of fit even with few parameters and, mainly, present a practical and/or biological interpretation for the estimates of these parameters, non-linear regression models are widely used in the most diverse areas of knowledge, mainly in the study of growth curves (FERNANDES et al., 2020; LI et al., 2022; SANTOS et al., 2019).

However, fits of non-linear models present eventually violate the assumptions of the residual vector, in which the lack of normality is one of the most complicated problems to overcome, and in some cases the model is discarded by the researcher (SILVA et al., 2020). Nevertheless, when the unmet assumptions are the homogeneity of variances and independence, the estimation is commonly performed with variance weighting, using for example the inverse, and the incorporation of an autoregressive structure (AR) for the residuals, respectively (MUNIZ; NASCIMENTO; FERNANDES, 2017).

The fit of non-linear models eventually violates the assumptions of the model residuals, in which the lack of normality is one of the most complicated problems to overcome. Quantile regression is an alternative to circumvent these problems in the residual vector, thus allowing the adjustment of data for each observation.

Quantile regression is an alternative to circumvent these problems in the residual vector, thus allowing the adjustment of data for each observation without using averages and their grouping, in addition to allowing estimates in different quantiles, since it calculates the response of each quantile of the distribution (KOENKER; PARK, 1978). Galarza et al. (2020) states that quantile regression is more robust in the presence of outliers/influential observations and incorrect specification of error distributions compared to the conventional mean regression approach.

Non-linear models describe well several phenomena of nature, among them, the cumulative losses of ammonia ( $N - NH_3$ ) from fertilizers by nitrogen (N) volatilization (DE SOUZA et al., 2023). As this is a  $N - NH_3$  loss flow with no determined behavior, it is important to obtain an estimate, for example, of the day on which the maximum loss occurred and how long it took for

the maximum loss to occur. These losses accumulated over the evaluation time show a sigmoidal aspect (DE SOUZA et al., 2023; FERNANDES et al., 2017; FERNANDES et al., 2020).

The von Bertalanffy model is a unifying framework for the study of growth models, since its differential equation (BRUNNER; KÜHLEITNER; RENNER-MARTIN, 2021), in this way, this model can provide us with adequate fit for the description of the cumulative losses of  $N - NH_3$  during a certain time.

According to CONAB (2022), Brazil is the largest coffee producer in the world, and the estimate for the closing of the coffee harvest in the country, a year of high bienniality, indicates a production of more than 50 thousand bags of processed coffee, 6.7% above the 2021 growing season. This increase in coffee production has also been observed in recent years due to the expansion of areas with low fertility soils, where the use of fertilizers to replace nutrients becomes necessary (CONAB, 2022; MARTINEZ et al., 2020).

Despite an estimated increase of 1.8% in the area destined for Brazilian coffee growing in 2022 compared to the previous year (CONAB, 2022), the significant increase in production is also due to the technological change observed in coffee production, many investments in technology have been directed to the fertilization of coffee crops in Brazil. Among the factors affecting the yield of the *Coffea arabica L.* coffee plant, nitrogen nutrition stands out, as the deficiency of N severely limits the yield of the crop, since it is the nutrient required in greater quantity (BOSCHIERO et al., 2020; CHAGAS et al., 2016; MARTINEZ et al., 2020).

Studies such as that by SALAMANCA-JIMENEZ et al. (2017) and DE SOUZA et al. (2023) using N, showed that coffee plants at reproductive stages absorb less than 25% N fertilizer when applied as conventional urea. In this way, the development of technologies to improve the efficiency of N use in coffee growing is of paramount importance. The efficiency of nitrogen fertilization in coffee crops is mainly conditioned to the N source applied, as reported in several studies (DE SOUZA et al., 2023; DOMINGHETTI et al., 2016; FREITAS et al., 2022). Although urea is the lowest cost fertilizer per unit of N, when applied to the soil, under the action of urease and moisture, it is quickly broken down into  $NH_3$  and  $CO_2$  (SANTOS et al., 2020). Although this reaction in the soil is essential for supplying N to plants, the high activity of urease can lead to significant losses of N applied as urea.

In order to increase the efficiency of urea use, some technologies are adopted, aiming to reduce the rate of urea hydrolysis, with the use of urease inhibitors (stabilized fertilizers), or even through a physical barrier to the entry of water in the granule (FREITAS et al., 2022; SANTOS et al., 2020). Within the context of urease inhibitors, some organic molecules can be used, such as NBPT (N-(n-butyl) thiophosphoric triamide) and NPPT (N-(n-propyl) thiophosphoric triamide), the main urease inhibitors available in the market. Or even through the use of metals, which also have the ability to inhibit urease activity, such as copper and boron in the treatment of urea (FREITAS et al., 2022, SANTOS et al., 2020).

In this context, for a better understanding of the emission of  $N - NH_3$  with the application of urea-based fertilizers, this article aimed to use quantile regression to fit the non-linear von Bertalanffy model with a vector of non-normal residuals, to describe the cumulative losses of N by volatilization of ammonia from conventional urea, urea treated with copper and boron and urea coated with  $CaCO_3$  (urea + anionic polymer) in coffee plantations.

## Material and Methods

The data used in this study were obtained from work carried out under field conditions, and further details on handling and conducting the experiment can be found in Freitas et al. (2022).

The experiment was carried out at the Coffee Farming Sector/Department of Agriculture/UFLA, Lavras, state of Minas Gerais, Brazil, under field conditions, on a dystrophic red Latosol cultivated with coffee. The region where the experiment was carried out has a humid tropical climate Cwb, with dry winter and temperate summer, according to the Köppen classification. The climate has two distinct seasons, the dry season, from May to September, and the rainy season, from October to April. The average annual temperature is approximately 19°C, with an average rainfall of 1,493 millimeters (SOUZA et al., 2017).

The experimental design was in randomized blocks with three replications and the treatments were: Prilled urea, Ammonium sulfate, Urea dissolved in water, Ammonium nitrate, Urea + Cu + B, Urea + anionic polymer (Urea + adhesive +  $CaCO_3$ ), Urea + NBPT. The harvest took place between November 2015 and April 2016. Although the article published by Freitas et al. (2022) included all the treatments described, only the prilled Urea, urea + Cu + B and urea + anionic poly-

mer treatments were considered here, which violated the assumptions of residuals of the adjusted model. The treatments considered were observed in the second fertilization split.

Thus, fertilizers are characterized as: 1) conventional, Prilled urea, containing 45% N, 2) stabilized, urea treated with copper and boron, urea + Cu + B, containing 44% N; 0.4% B as boric acid and 0.15% Cu as copper sulfate, 3) anionic polymer, is a treatment based on the physical protection of the urea granule by an adhesive and calcium carbonate, containing 41 % N.

The evaluation of losses of  $N - NH_3$  by volatilization was carried out using semi-open collectors made of PVC. Losses were evaluated at 1, 2, 3, 4, 5, 7, 9, 12, 15, 19, 24 and 31 days after the application of fertilizers as topdressing to the coffee plant. To arrive at the values of cumulative losses, the losses of days 1 and 2 were added, adding this value obtained to the losses of day 3, and so on until the last day of collection.

The non-linear von Bertalanffy model was adjusted, in which, according to Fernandes et al. (2020) the most appropriate parameterization is:

$$y_i = a \left( 1 - \frac{\exp(k \times (b - x_i))}{3} \right)^3 + \varepsilon_i$$

where  $y_i$  represents the observed cumulative values of losses of  $N - NH_3$   $i = 1, \dots, 12$ ,  $a$  represents the horizontal asymptote, that is, the highest percentage of N released by the fertilizer,  $k$  represents the growth index (the higher  $k$  is, the less time fertilizers take to reach  $a$ ),  $b$  can be interpreted as the abscissa of the inflection point, from which growth slows down. While  $\varepsilon_i$  corresponds to the random error, which is assumed to be independently and identically distributed following a normal distribution with zero mean and constant variance, that is,  $\varepsilon_i \sim N(0, \sigma^2)$  (FERNANDES et al., 2020).

The significance of parameters was verified by the t-test at the 5% level, testing the following hypothesis: the estimates are equal to zero ( $\theta_i$ ), that is, they do not contribute to the adjusted model. Residual analysis was performed using the Shapiro-Wilk, Breusch-Pagan and Durbin-Watson tests to check the assumptions of normality, homogeneity of variances and independence of residuals, respectively (FERNANDES et al., 2022).

After the first fit of the model, if residual dependence is observed, the parameters will be estimated by the method of generalized least squares, incorporating the autoregressive parameter of

order  $p$  to the residual (FRÜHAUF et al., 2020). If there is a violation of the variance heterogeneity assumption on the cumulative loss curves of  $N - NH_3$ , the variance between the losses at each time  $i$  and the inverse of this variance calculated in the various classes of observations, from the beginning to the stabilization, will be considered. If the assumption of normality is not met, data will be transformed, such as logarithmic or root transformations to estimate new parameters.

In case of non-validation of assumptions, even after the aforementioned techniques, the model will be fit using quantile regression, which satisfactorily incorporates the lack of normality and heteroscedasticity in the residual vector (KOENKER, 2005). The median ( $\tau = 0.50$ ) and the quantiles  $\tau = 0.25$  and  $\tau = 0.75$  were used. Quantile regression is more robust in the presence of outliers/influential observations and incorrect specification of error distributions when compared to the conventional mean regression approach (GALARZA et al., 2020).

The non-linear quantile regression model can be written as

$$\mathbf{Y} = f(\mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}(\tau)) + \boldsymbol{\varepsilon}(\tau)$$

$$\mathbf{Y} = f(\mathbf{X}, \boldsymbol{\theta}(\tau)) + \boldsymbol{\varepsilon}(\tau)$$

where,  $\mathbf{Y}$  is the vector of the response variable;  $\mathbf{X}$  is the matrix of one or more independent variables;  $\boldsymbol{\theta}(\tau)$  is the vector of parameters at the  $\tau$ -th quantile of  $\mathbf{Y}$ ,  $f(\cdot)$  is the functional form that expresses the non-linear relationship between the variables and  $\boldsymbol{\varepsilon}(\tau)$  is the vector of independent and identically distributed errors with probability density function  $f_\tau(\cdot)$  and order quantile  $\tau$  equal to zero, i.e.  $\int_{-\infty}^0 f_\tau(\varepsilon_i) d\varepsilon_i = \tau$  (MORALES et al., 2017).

The non-linear quantile regression von Bertalanffy model is given by:

$$y_i = a(\tau) \left( 1 - \frac{\exp(k(\tau) \times (b(\tau) - x_i))}{3} \right)^3$$

adjusted in quantiles  $\tau = 0.25$ ,  $\tau = 0.50$  and  $\tau = 0.75$ , where  $\tau$  refers to the assumed quantile ( $\tau \in [0.1]$ ). This model was adjusted by an Interior Point Algorithm, proposed by Koenker and Park (1996), which aims to compute quantile regression estimates for cases where the response function is non-linear in the parameters. The mean square of the residual and the mean absolute deviation of the adjusted models were calculated.

All analyses were run using specific routines and packages (*nlme*, *car*, *lmtest*) of R software (R CORE TEAM, 2020). To fit non-linear quantile regression models, the *quantreg* package (KOEENKER, 2016) was used.

Although the two other treatments, compared to Prilled Urea, were proposed with the objective of reducing the cumulative losses of  $N - NH_3$  by volatilization, we observed a greater efficiency in the use of urea treated with copper and boron (Urea + Cu + B), which presented a cumulative loss of 0.9% ( $900 \text{ g ha}^{-1}$ ), followed by Prilled Urea, with a value of 14.4% ( $14.4 \text{ kg ha}^{-1}$ ). The Urea + Anionic Polymer treatment showed the greatest loss between treatments, 21.6% applied N ( $21.6 \text{ kg ha}^{-1}$ ).

There are different methods in the literature to analyze longitudinal data, including MANOVA, repeated measures ANOVA, mixed models, generalized linear models and different non-linear models. A common feature of these methods is that they generally use the mean as a measure of centrality. However, as is well known, the mean is not a good measure of centrality for asymmetric data. In these situations, it often has low efficiency compared to other position estimators. Still, what is most important in a practical situation is that it is difficult, especially for non-statisticians, to interpret what the mean measures when the data is skewed. In contrast to this, the median, in addition to often having greater efficiency than the mean for asymmetric data, is always easily interpretable (KARLSSON, 2007).

Quantile regression applications are commonly used for problems with large sample sizes (ZHAO; YU, 2020). However, the technique was applied in cases of asymmetry problems in the data with few repetitions. There are different ways to get around the problem of residual normality, such as transforming the data, or considering different distributions for the errors, as presented by Chen; Zeng; Song (2014).

## Results

Figure 2.8 presents the data referring to the daily losses of nitrogen by volatilization of  $N - NH_3$  in the 2015/2016 season for the three splits (a, b and c) over 31 days after each topdressing fertilization, and the climatic data (d).

Figura 3.6 – Daily losses of  $N - NH_3$  by volatilization in the first, second and third splits, respectively (a, b and c) of conventional and stabilized nitrogen fertilizers and climatic conditions (d) of the 2015/2016 growing season.

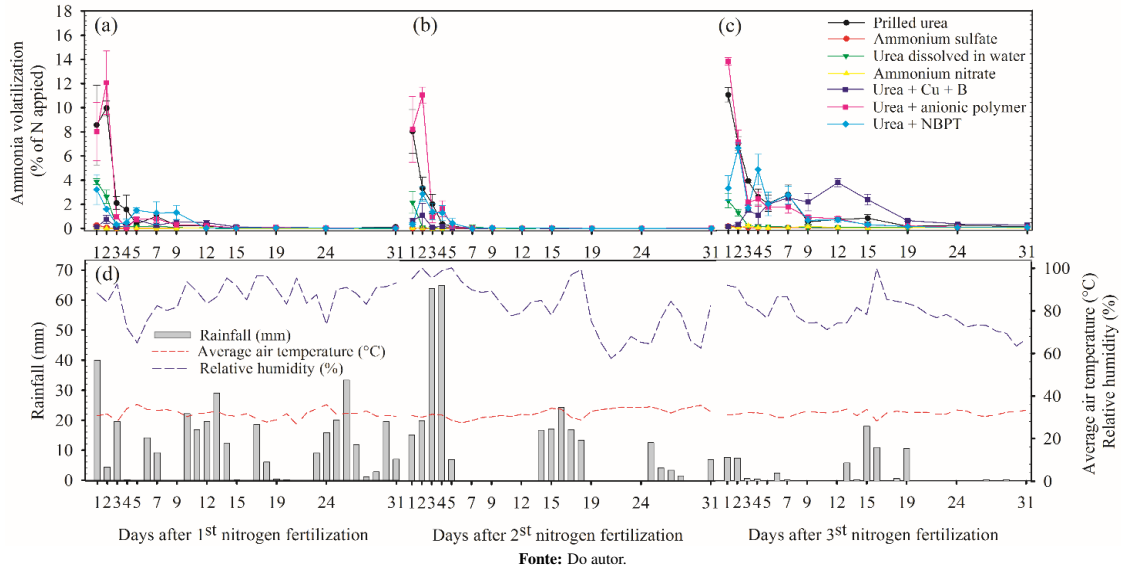
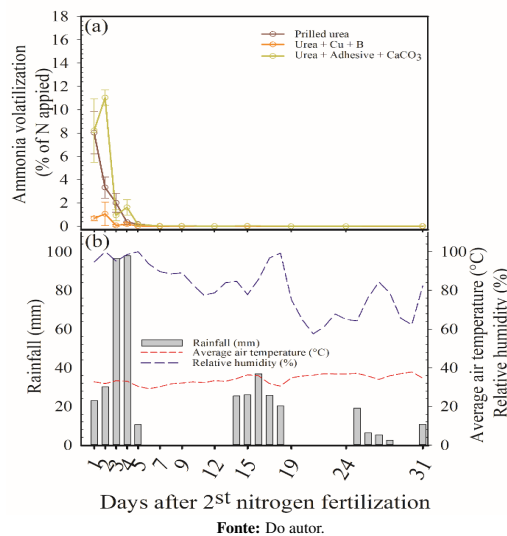


Figure 2.9 shows data referring to daily nitrogen losses by volatilization of  $N - NH_3$  in the 2015/2016 season for the second split (a) over 31 days after each topdressing fertilization, and climate data (b).

Figura 3.7 – Daily losses of  $N - NH_3$  by volatilization in the second split (a) of conventional and stabilized nitrogen fertilizers and climatic conditions (d) of the 2015/2016 harvest.





The treatments considered were observed in the second fertilization split, in which there was higher cumulative rainfall in the first 5 days (171.2 mm).

Table 2.2 presents the p-values of the residual tests of the von Bertalanffy model fit for the mean of the data. When analyzing the results obtained by the Shapiro-Wilk and Durbin-Watson tests, considering a significance level of 5%, the test results were significant, that is, the estimated model violated the assumptions of normality and independence.

Tabela 3.2 – P-value of the Shapiro-Wilk (normality), Durbin-Watson (independence) and Breusch-Pagan (homoscedasticity) tests applied to the residuals of the von Bertalanffy model for the average of the data of cumulative losses of  $N - NH_3$  by volatilization.

Tratamento	Shapiro-Wilk	Durbin-Watson	Breusch-Pagan
Prilled Urea	< 0.001	0.012	0.346
Urea + Cu + B	0.001	0.002	0.348
Urea + Anionic Polymer	< 0.001	0.004	0.347

Table 2.3 lists the means, standard deviations and minimum and maximum values of the data of cumulative losses of  $N - NH_3$ , for the treatments that presented problems in the analysis of residuals in the adjustment for the average of the data, which were the treatments: Prilled Urea, Urea + Cu + B and Urea + Anionic Polymer, in the second split of the 2015/2016 harvest.

Tabela 3.3 – Means, standard deviations and minimum and maximum values of data on cumulative losses of  $N - NH_3$ , for the second split of the 2015/2016 growing season.

Dia	Prilled Urea				Urea + Cu + B				Urea + Anionic Polymer			
	Min	Max	Média	SD	Min	Max	Média	SD	Min	Max	Média	SD
1	5.4763	11.5442	8.0213	3.1499	0.2983	0.9258	0.6783	0.3341	4.3415	13.4839	8.2121	4.7295
2	7.2952	16.5219	11.3464	4.7150	0.3697	4.0042	1.7425	1.9736	16.6881	23.9092	19.2493	4.0422
3	8.1547	18.1268	13.3591	5.0004	0.3797	4.2268	1.8200	2.0978	17.9817	24.1114	20.1931	3.4027
4	8.4810	18.4583	13.7143	5.0066	0.4795	4.6717	2.0062	2.3165	19.3315	24.7489	21.8163	2.7363
5	8.6495	18.6802	13.8950	5.0311	0.5361	4.6768	2.0346	2.2951	19.4072	24.9567	21.9609	2.8010
7	8.6495	18.6802	13.9075	5.0329	0.5361	4.6768	2.0346	2.2951	19.4553	24.9567	21.9962	2.7746
9	8.6831	18.7022	13.9416	5.0280	0.5653	4.6782	2.0491	2.2832	19.4756	24.9983	22.0271	2.7852
11	8.6972	18.7171	13.9517	5.0278	0.5843	4.6784	2.0616	2.2726	19.4825	25.0092	22.0367	2.7870
14	8.7107	18.7511	13.9754	5.0380	0.5843	4.6912	2.0695	2.2771	19.5076	25.0465	22.0684	2.7930
18	8.7107	18.7569	13.9774	5.0408	0.5843	4.6912	2.0695	2.2771	19.5076	25.0504	22.0697	2.7950
22	8.7145	18.7569	13.9810	5.0391	0.5843	4.6912	2.0695	2.2771	19.5076	25.0504	22.0701	2.7949
31	8.7272	18.7748	13.9912	5.0410	0.5843	4.6912	2.0695	2.2771	19.5463	25.0504	22.0945	2.7747

A first-order autoregressive parameter AR(1) was included, a new residual analysis was performed to check whether the assumption of independence was met. The plot of the partial autocorrelation function of the fit residuals showed that the first-order autoregressive parameter ( $\phi$ )

was not sufficient to model the residual dependence. The Breusch-Pagan test was not significant, indicating that the residuals showed homogeneity of variance.

The possible solutions mentioned in the methodology did not solve the problem of adjustment, so there is a proposal to work with quantile regression as a solution for deviations from the assumptions of the residuals. Here, as there are three repetitions, three quantiles were chosen ( $\tau = 0.25$ ,  $\tau = 0.50$  or  $\tau = 0.75$ ), which are frequently used in the literature (MORALES et al., 2017). Thus, choosing  $\tau = 0.25$  means that we are in a scenario where the adjusted model is taking into account the 25% lowest values observed in the sample (percentile 25%), following this pattern for the other quantiles.

Table 2.4 lists the parameter estimates and their respective standard errors based on the fit of the von Bertalanffy model by the ordinary least squares method and quantile regression in quantiles  $\tau = 0.25$ ,  $\tau = 0.50$  and  $\tau = 0.75$ .

Tabela 3.4 – Estimates of the parameters of the von Bertalanffy model adjusted by the method of ordinary least squares (OLS) and by quantile regression (QR), for the second split.

		<i>a</i>	<i>b</i>	<i>k</i>
Prilled Urea	OLS	13.9868	0.3524*	1.0301
	$\tau = 0.25$	8.7196	0.0997*	0.9351*
	$\tau = 0.50$	14.4644	0.5973*	1.1092*
	$\tau = 0.75$	18.7024	0.3784*	1.3000*
Urea + Cu + B	OLS	2.0450	0.9383	1.5403*
	$\tau = 0.25$	0.5864	0.2838*	0.3910*
	$\tau = 0.50$	0.9348*	8.2087*	0.2152*
	$\tau = 0.75$	4.6784	1.1776	1.2644*
Urea + Anionic Polymer	OLS	21.9458	0.8920	1.7047
	$\tau = 0.25$	19.5075	1.0815	2.0503
	$\tau = 0.50$	21.6290	0.9712	1.4575
	$\tau = 0.75$	24.9985	0.5745*	1.3715

\*not significant at 5%

Observing the estimates of the parameters of the von Bertalanffy model adjusted by the method of ordinary least squares (OLS) and by quantile regression (QR) (Table 2.4), it is noted that, for the treatments Prilled urea and Urea + anionic polymer (Urea + adhesive +  $CaCO_3$ ), there was great similarity between the mean and median value ( $\tau = 0.50$ ). However, the same behavior was not observed for Urea + Cu + B.

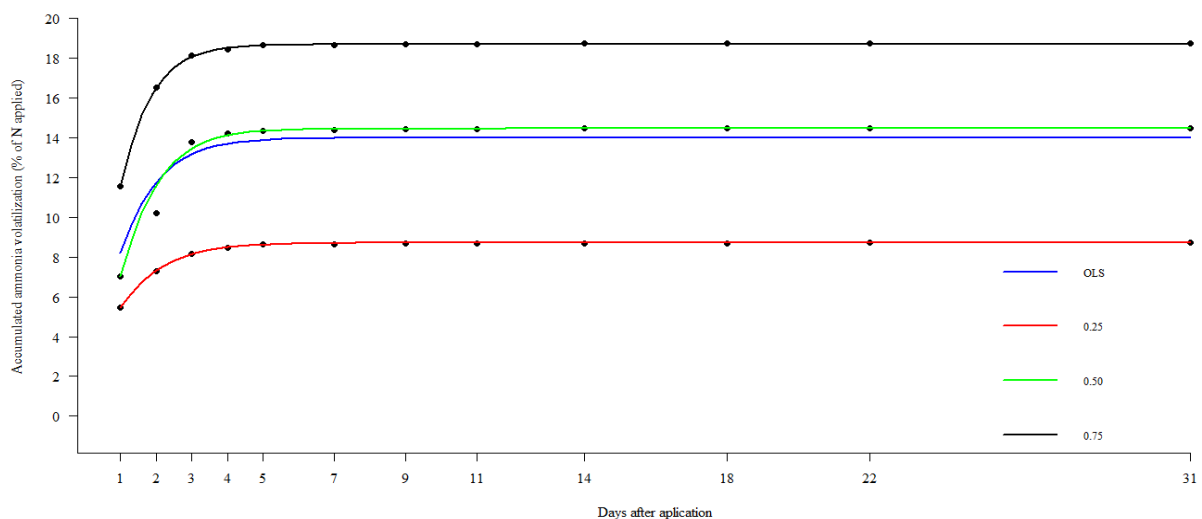
In general, there was a problem regarding the significance of parameter  $b$ , which represents the abscissa of the inflection point, this can be explained due to the fact that, in general, the maximum volatilization rate occurs before the first day, assuming values close to zero.

For Prilled urea, the maximum daily loss value was 14.46% at 0.59 days after application. And although the attempt to use the Urea + Anionic Polymer technology is to reduce losses in relation to Prilled Urea, this did not occur, since this treatment presented maximum loss already at 0.97 days after application, but with a value of 21.6% applied N. While for the Prilled Urea and Urea + Anionic Polymer treatments, the best way to present the results is by using the median ( $\tau = 0.50$ ), for the Urea + Cu + B treatment, it was not possible to carry out this interpretation.

In this case, it is up to the researcher to define which quantile should be used for parameter estimation. If we consider  $\tau = 0.25$ , the maximum loss day occurs at 0.28 days, with a maximum daily loss value of 0.58% applied N. Whereas, with  $\tau = 0.75$ , that day's maximum loss would be 1.17, but with the highest estimated value of 4.67% applied N.

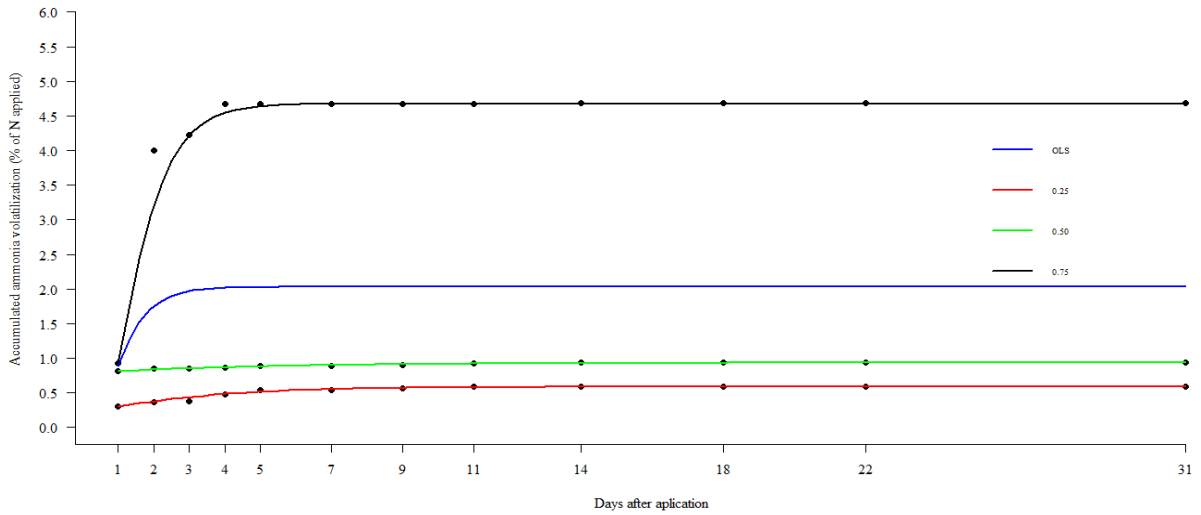
Figures 2.10, 2.11 and 2.12 illustrate the cumulative losses of  $N - NH_3$  by volatilization in the second split of Prilled Urea, Urea + Cu + B and Urea + Anionic Polymer for the 2015/2016 harvest.

Figura 3.8 – Cumulative losses of  $N - NH_3$  by volatilization in the second split of Prilled Urea in the 2015/2016 harvest.



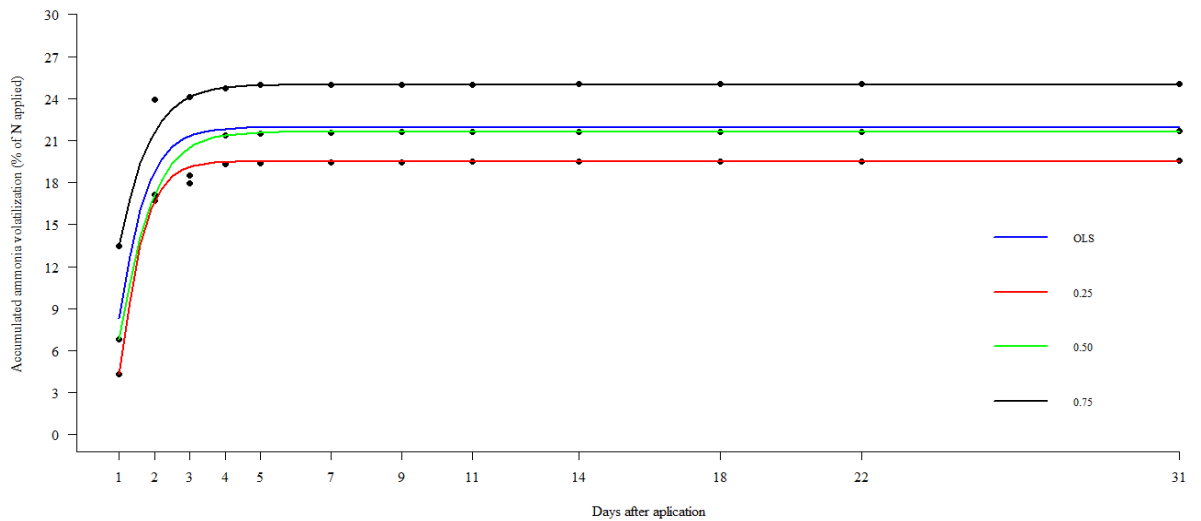
Fonte: Do autor.

Figura 3.9 – Cumulative losses of  $N - NH_3$  by volatilization in the second split of Urea + Cu + B in the 2015/2016 harvest.



Fonte: Do autor.

Figura 3.10 – Cumulative losses of  $N - NH_3$  by volatilization in the second split of Urea + Anionic Polymer in the 2015/2016 harvest.



Fonte: Do autor.

## Discussion

For quantile regression methods to be applied to models with a non-linear relationship between covariates and response, Karlsson (2007) applied quantile regression to non-linear longitudinal data. Geraci; Bottai (2014) considered an extension to complex dependency structures in the data, which are modeled by including multiple random effects in linear conditional quantile

functions. Geraci (2019) developed the non-linear conditional quantile method to use when data are grouped in two-level nested designs. All methods mentioned above were developed based on quantile regression.

Observing figure 2.11, there was a large difference between one of the repetitions of the Urea + Cu + B treatment, which was due to the second observation of the anomalous repetition, which can be considered an outlier, since its value is completely different from the standard for this treatment (FREITAS et al., 2022). Being the only treatment that presented a non-significant parameter  $a$  for the median ( $\tau = 0.50$ ).

Observing Table 2.3, the Urea + Anionic Polymer treatment has the widest range of loss from the first to the second day and the Urea + Cu + B treatment has the lowest standard deviations from the fifth day of observations.

This occurs because, in general, fertilizer technologies are used to increase the efficiency of urea use as a source of N. When Prilled urea is applied to the soil, without any strategy or technology to reduce its solubility or to inhibit some stage of N transformation in the soil, this is quickly transformed into  $N - NH_3$  and  $CO_2$ , and this  $N - NH_3$  is lost to the atmosphere as gas (SANTOS et al., 2020; SILVA et al., 2017).

However, when urea is treated with inhibitors, as in the case of copper and boron, these metals are inhibitors of the urease enzyme, which catalyzes the hydrolysis of urea in the soil. The inhibition mechanism that ensures the reduction of losses is due to the ability of copper to bind to the sulfhydryl groups of urease, inactivating it (KAFARSKI; TALMA, 2018; ZABORSKA et al., 2004), at the same time that the boric acid ( $H_3BO_3$ ) also has inhibition capacity, but with a different mechanism than copper (Santos et al, 2021).  $H_3BO_3$  has a structure similar to urea, and has the ability to almost perfectly replace water molecules linked to N in the reaction center (BENINI et al., 2004; SVANE et al., 2020).

In the present study, for example, the reduction in losses of Urea + Cu + B in relation to prilled urea reached 15 times, possibly influenced by the reduction in daily losses of  $N - NH_3$  in the first 5 days, when there were greater precipitations. Although several attempts have been made with different compounds to inhibit urease activity or promote a physical barrier to water entry, ensuring slower urea dissolution when applied to the soil, not all of these technologies are

efficient in reducing  $N - NH_3$  losses by volatilization. This occurred in the Urea + Anionic Polymer treatment, which showed a loss value 49% higher than prilled urea. When comparing the losses of  $N - NH_3$  by this source, it is noted that, despite the high volume of precipitation in the first 5 days, there was no efficiency in reducing losses in relation to prilled urea. Probably, the high porosity of  $CaCO_3$  was not able to prevent the entry of water inside the granule, and also, the presence of calcium carbonate, even though it has low solubility, has the capacity to raise the pH around the granule, consequently increasing the losses of  $N - NH_3$  to the atmosphere (FREITAS et al., 2022).

Urea + Cu + B was the only treatment with a non-significant parameter  $a$  in the model fit to the median. Parameter  $b$  is associated with the abscissa of the inflection point of the curve, that is, from that moment the acceleration rate decreases, until it stabilizes, it presents a value outside the standard of the other estimates and non-significant. The justification for this difference between the repetitions of this treatment is because the experiment was carried out under field conditions, where it is not always possible to isolate all the variables that may cause discrepancies in values obtained in each repetition.

Although the semi-open collector method is highly recommended for measuring  $N - NH_3$  losses under field conditions (SANTOS et al., 2020; YANG et al., 2018), as it is a methodology that involves several steps, such as sponge preparation, sample collection, sponge washing, aliquot pipetting for N analysis, distillation and titration. During the development of this analytical process, errors may occur, which may accumulate when considering the cumulative losses (outliers). In this study, this behavior was observed, as there was a loss value (4% N applied) found in one repetition, which increases the cumulative losses of  $N - NH_3$  by the Urea + Cu + B treatment.

Quantile regression, unlike other methods that use conditional means ( $E(Y|X)$ ) to obtain the functional relationship between variables, uses conditional quantiles ( $Q(Y|X)$ ), adjusting the relationship between independent variables and quantiles (percentiles) of the dependent variable (PUIATTI et al., 2018; OLIVEIRA et al., 2021). The split in which the adjustments of these treatments that violated the assumptions of non-linear regression was the one with the highest rainfall, which may have contributed to this different behavior in the sample data, leading to the violation of the regression assumptions.

The results indicate that estimates of the von Bertalanffy model using quantile regression adequately represent the  $N - NH_3$  volatilization data, especially for the case of median regression (when there is no outlier), but the further from the median are the quantiles, the largest mean square of the residuals and the greatest mean absolute deviation were calculated and observed, according to the result of Karlsson (2007).

### Conclusion

The non-linear quantile regression proved to be a good alternative to describe cumulative losses of  $N - NH_3$  by volatilization for the treatments of Prilled Urea, Urea + Cu + B and Urea + Anionic Polymer of the 2015/2016 growing season. For the treatments of Prilled Urea and Urea + Anionic Polymer, the fit to the median ( $\tau = 0.50$ ) is equivalent to the fit to the mean, with a maximum cumulative loss of 14.46% and 21.62%, respectively. As for the treatment of Urea + Cu + B, which contained atypical observations,  $\tau = 0.50$  is not indicated, as no parameter was significant.

### Conflict of interests

No potential conflicts of interest were reported by the authors.

### Referências

BRUNNER, N.; KÜHLEITNER, M.; RENNER-MARTIN, K. Bertalanffy-Pütter models for avian growth. **Plos one**, v. 16, n. 4, p. e0250515, 2021.

BENINI, S. et al. Molecular details of urease inhibition by boric acid: insights into the catalytic mechanism. **Journal of the American Chemical Society**, v. 126, n. 12, p. 3714-3715, 2004.

BOSCHIERO, B. N. et al. Nitrogen fertilizer effects on sugarcane growth, nutritional status, and productivity in tropical acid soils. **Nutrient Cycling in Agroecosystems**, v. 117, n. 3, p. 367-382, 2020.

CHAGAS W. F. T. et al. Ammonia volatilization from blends with stabilized and controlled-released urea in the coffee system. **Science and Agrotechnology**, v. 40, p. 497-509, 2016

CHEN, X.; ZENG, Q.; SONG, Q.. Likelihood inference of nonlinear models based on a class of flexible skewed distributions. In: **Abstract and Applied Analysis**. Hindawi, 2014.

CONAB, CN de A. **Acompanhamento da safra brasileira de café safra 2022**. Quarto levantamento, Brasília, v. 9, n. 4, p. 1-53, 2022.

DE SOUZA, T. L. et al. Nitrogen fertilizer technologies: Opportunities to improve nutrient use efficiency towards sustainable coffee production systems. **Agriculture, Ecosystems & Environment**, v. 345, p. 108317, 2023.

DOMINGHETTI, A. W. et al. Nitrogen loss by volatilization of nitrogen fertilizers applied to coffee orchard. **Science and Agrotechnology**, v. 40, p. 173-183, 2016.

FERNANDES, T. J. et al. Double sigmoidal models describing the growth of coffee berries. **Ciência Rural**, v. 47, n. 8, 2017.

FERNANDES, F. A. et al. Parametrizações do modelo de von Bertalanffy para descrição de curvas de crescimento. **Brazilian Journal of Biometrics**, [SI], v. 38, n. 3, pág. 369-384, set. 2020.

FERNANDES, J. G. et al. Description of the peach fruit growth curve by diphasic sigmoidal nonlinear models. **Revista Brasileira de Fruticultura**, v. 44, 2022.

FREITAS, T. et al. Technologies for Fertilizers and Management Strategies of N-Fertilization in Coffee Cropping Systems to Reduce Ammonia Losses by Volatilization. **Plants**, v. 11, n. 23, p. 3323, 2022.

GERACI, M.; BOTTAI, M. Linear quantile mixed models. **Statistics and computing**, v. 24, p. 461-479, 2014.

GERACI, M. Modelling and estimation of nonlinear quantile regression with clustered data. **Computational statistics & data analysis**, v. 136, p. 30-46, 2019.

GALARZA, C. E. et al. Quantile regression for nonlinear mixed effects models: a likelihood based perspective. **Statistical Papers**, v. 61, n. 3, p. 1281-1307, 2020.

KARLSSON, A. Nonlinear quantile regression estimation of longitudinal data. **Communications in Statistics-Simulation and Computation**, v. 37, n. 1, p. 114-131, 2007.

KAFARSKI, P.; TALMA, M. Recent advances in design of new urease inhibitors: A review. **Journal of advanced research**, v. 13, p. 101-112, 2018.

KOENKER, R. **Quantile Regression**. [S.l.]: Cambridge University Press, 2005. 349 p.

KOENKER, R.; BASSETT JR., G. Regression quantiles. **Econometrica**, Menasha, v.46, p.33-50, 1978



KOENKER, R.; PARK, B.J. An interior point algorithm for nonlinear quantile regression. **Journal of Econometrics**, 71, 265-283. 1996.

KOENKER R. quantreg: Quantile Regression. R package version 5.21, 2016. Disponível em: <<https://cran.r-project.org/web/packages/quantreg/index.html>>. . Acesso em: 17/01/2022.

LI, Q. et al. Describing Lettuce Growth Using Morphological Features Combined with Nonlinear Models. **Agronomy**, v. 12, n. 4, p. 860, 2022.

MORALES, C. G. et al. Robust quantile regression using a generalized class of skewed distributions. **Stat**, v. 6, n. 1, p. 113-130, 2017.

MARTINEZ, H. E. P. et al. Water deficit changes nitrate uptake and expression of some nitrogen related genes in coffee-plants (*Coffea arabica* L.). **Scientia Horticulturae**, v. 267, p. 109254, 2020.

MUNIZ, J. A.; NASCIMENTO, M. da S.; FERNANDES, T. J. Nonlinear models for description of cacao fruit growth with assumption violations. *Revista Caatinga*, v. 30, p. 250-257, 2017.

OLIVEIRA, A. C. R et al. Nonlinear models based on quantiles in the fitting of growth curves of pepper genotypes. **Brazilian Journal of Biometrics**, v. 39, n. 3, 2021.

PUIATTI, G. A. et al. Quantile regression of nonlinear models to describe different levels of dry matter accumulation in garlic plants. **Ciência Rural**, v. 48, 2018.

R CORE TEAM. **R**: A language and environment for statistical computing. Vienna: R Foundation for Statistical Computing, 2020. <https://www.r-project.org>. 20 Jan. 2022.

SALAMANCA-JIMENEZ, A.; DOANE, T. A.; HORWATH, W. R. Nitrogen use efficiency of coffee at the vegetative stage as influenced by fertilizer application method. **Frontiers in plant science**, v. 8, p. 223, 2017.

SANTOS, C. J.; THIERSCHE, C. R.; MOREIRA, M. F. B. Non-linear quantile regression for site classification in *Eucalyptus* sp. stands. **Scientia Forestalis**, n. 120, p. 551-561, 2020.

SANTOS, A. L. P. et al. Generation of models from existing models composition: An application to agrarian sciences. **PloS one**, v. 14, n. 12, p. e0214778, 2019.

SANTOS, C. F. et al. Environmentally friendly urea produced from the association of N-(n-butyl) thiophosphoric triamide with biodegradable polymer coating obtained from a soybean processing byproduct. **Journal of Cleaner Production**, v. 276, p. 123014, 2020.

- SARKIS, L. F. et al. Carbon Dioxide Flux of Conventional and Slow or Controlled Release Nitrogen Fertilizers in Coffee Crop. **Communications in Soil Science and Plant Analysis**, v. 52, n. 22, p. 2884-2897, 2021.
- SILVA, A. G. B. et al. Urease inhibitor NBPT on ammonia volatilization and crop productivity: A meta-analysis. **Agronomy Journal**, v. 109, n. 1, p. 1-13, 2017.
- SILVA, É. M. da et al. Description of blackberry fruit growth by nonlinear regression models. **Revista Brasileira de Fruticultura**, v. 42, 2020.
- SVANE, S. et al. Inhibition of urease activity by different compounds provides insight into the modulation and association of bacterial nickel import and ureolysis. **Scientific reports**, v. 10, n. 1, p. 8503, 2020.
- YANG, Y. et al. Measuring field ammonia emissions and canopy ammonia fluxes in agriculture using portable ammonia detector method. **Journal of cleaner production**, v. 216, p. 542-551, 2019.
- ZABORSKA, W.; KRAJEWSKA, B.; OLECH, Z. Heavy metal ions inhibition of jack bean urease: potential for rapid contaminant probing. **Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry**, v. 19, n. 1, p. 65-69, 2004.
- ZHAO, P.; YU, S. An Improved Interior Point Algorithm for Quantile Regression. **IEEE Access**, v. 8, p. 139647-139657, 2020.

## CONSIDERAÇÕES FINAIS

O presente trabalho apresentou diferentes aplicações do modelo não linear de von Bertalanffy. O primeiro artigo mostrou que modelo de von Bertalanffy se mostrou adequado para avaliar o crescimento de coelhos mestiços em diferentes métodos (longitudinal e transversal). Apesar de alguns estudos utilizarem o método transversal para a coleta de dados, esse foi o primeiro até então encontrado, que fez a comparação entre os métodos, verificando estimativas de parâmetros e pontos influentes na curva de crescimento. No segundo e terceiro artigo traz uma nova abordagem de modelagem, por meio do modelo não linear de von Bertalanffy, para perdas acumuladas de  $N - NH_3$  de fertilizantes convencionais e de eficiência aumentada, o qual se mostrou uma boa alternativa para descrever o padrão de acúmulo destas perdas. Verificou-se também que em casos de violação dos pressupostos de resíduos pode-se utilizar a regressão quantílica, mesmo quando temos poucas repetições, e que o ajuste para a mediana ( $\tau = 0,50$ ) é equivalente ao da média, para algumas situações, como por exemplo a não existência de possíveis outliers.

## APÊNDICE - Comandos no R

```

#####
# Script do software R utilizado para estimação dos parâmetros, testes#
# estatísticos e geração de gráficos dos modelos não lineares ajustados#
#####

### AJUSTE PARA OS DADOS DO PRIMEIRO ARTIGO

## PACOTES NECESSÁRIOS

library(nlme)  ## Precisa caso queira usar a gnls
library(car)   ## Precisa para o teste de Durbin-Watson
library(lmtest) ## Precisa para o teste de Breush-Pagan
library(qpcR)  ## Precisa para calcular o R2_ajustado direto
library(MASS)

x <- c(0,4,9,17,24,30,37,45,52,59,67,75,82,89,96,103,111,119,123,129,135,
145,150)
y <- c(52,92,172,170,382,478,610,702,1180,1744,2104,2268,2423,2804,3116,
3228,2848,2917,3230,3367,3494,3760,3650)

plot(x, y,xlab="Idade",ylab="Peso")

ber <- nls(y~a*(1-exp(k*(b-x))/4)^4, start=c(a=4000,b=50,k=0.05))
summary(ber)

# NORMALIDADE
shapiro.test(residuals(ber))

```

```

# INDEPENDÊNCIA
MG1=attr(ber$m$fitted(),"gradient")
mlg1=lm(y~-1+MG1)
durbinWatsonTest(mlg1)

# HOMOCEDESTICIDADE
bptest(mlg1)

#QUALIDADE DE AJUSTE
library(qpcR) ## Precisa para o calculo do R2
Rsq(ber)
AIC(ber)
library(AICcmodavg)
AICc(ber)

ber2 <- gnls(y~a*(1-exp(k*(b-x))/4)^4, start=c(a=4000,b=50,k=0.05),
correlation = corAR1(),control = list(tolerance=100))
summary(ber2)

#GRÁFICO DO AJUSTE
plot(y~x,ylab="Peso (em gramas)", xlab= "Tempo (em dias)")
lines(x,fitted(ber),col="blue")

a=coef(ber)[1]
b=coef(ber)[2]
k=coef(ber)[3]

y_2 = a*k*exp(k*(b-x))*(1-((exp(k*(b-x)))/4))^3

```

```

## SEGUNDA DERIVADA
plot(x,y_2,col=2, type="o",pch=28,xlab= "Tempo (dias)",ylab="Peso (g)")
PAM=max(y_2); PAM
abline(v=49.52773)
legend("topleft", legend="f''(x)", lty=1, col=2, lwd=2, bty="n")

confint.default(ber)

x <- c(0,4,11,18,25,32,39,46,53,60,67,74,81,88,95,102,109,116,123,130,137,
144,151)

a1=3817.908
b1=49.52773
k1=0.02754429

dy=function(x,a1,b1,k1){
a1*k1*exp(k1*(b1-x)) * (1-((exp(k1*(b1-x)))/4))^3}

# plotando a curva da primeira derivada
curve(dy(x,a1=3817.908,
b1=49.52773,
k1=0.02754429),
xlim=range(0,155),ylim=c(0,50),
xlab= "Time (days)",ylab="weight gain (g.day)",
main = "Aceleração do ganho de peso",axes=F)
axis(1,c(-10,0,15,30,45,60,75,90,105,120,135,150,165),
las=1,pch=16, type ="o", cex.axis=1.2)
axis(2,at=seq(-10,50,10), cex.axis=1.2)

```

```

points(49.52773,dy(49.52773,
a1=3817.908,
b1=49.52773,
k1=0.02754429),pch=16) ## Inflection point
points(b1,dy(b1,
a1=a1,
b1=b1,
k1=k1),pch=16) ## Inflection point

```

```

points(45.4377,max(dy(b1,
a1=a1,
b1=b1,
k1=k1)),pch="|") ## Lower limit
points(53.61775,max(dy(b1,
a1=a1,
b1=b1,
k1=k1)),pch="|") ## Upper limit

```

```

segments(x0=45.4377,y0=max(dy(b1,
a1=a1,
b1=b1,
k1=k1)),
x1=53.61775,y1=max(dy(b1,a1=a1,
b1=b1,
k1=k1))) ## CI of the XIP

```

```
#####
```

```
### AJUSTE PARA OS DADOS DO TERCEIRO ARTIGO
```

```
## PACOTES NECESSÁRIOS

library(readxl)
library(dplyr)
library(quantreg)
library(qpcR)
library(nlme) ## Precisa caso queira usar a gnls
library(car) ## Precisa para o teste de Durbin-Watson
library(lmtest) ## Precisa para o teste de Breush-Pagan
#install.packages("remotes")
#remotes::install_github("OnofriAndreaPG/aomisc")
#library(aomisc)

# LENDO OS DADOS

dados <- read_excel("tesequant.xlsx")

unique(dados$Tratamento)
names(dados)

## UREIA PEROLADA ##

dados_trat1 <- dados %>% filter(Tratamento=='Ureia perolada')

ber1 <- nls(Acumulada~ a*(1-exp(k*(b-DAA))/3)^3, start=c(a=24, b=2,
k=0.9), data=dados_trat1)
summary(ber1)
```



```
ber1_q1 <- nlrq(Acumulada~ a*(1-exp(k*(b-DAA))/3)^3, start=c(a=24, b=2,
k=0.9), data=dados_trat1, tau=0.25)
summary(ber1_q1)
```

```
ber1_q2 <- nlrq(Acumulada~ a*(1-exp(k*(b-DAA))/3)^3, start=c(a=24, b=2,
k=0.9), data=dados_trat1, tau=0.50)
summary(ber1_q2)
```

```
ber1_q3 <- nlrq(Acumulada~ a*(1-exp(k*(b-DAA))/3)^3, start=c(a=24, b=2,
k=0.9), data=dados_trat1, tau=0.75)
summary(ber1_q3)
```

```
par(family = "serif", font.lab = "Times New Roman",font.axis = "Times New
Roman", size=10)
```

```
a <- plot(dados_trat1$DAA,dados_trat1$Acumulada, xlab="Days after aplication",
ylab="Accumulated ammonia volatilization (% of N applied)",
ylim=c(-1,20), main="", las=1, pch=16, axes=F, cex=1, dpi=500)
axis(1,c(-50,1,2,3,4,5,7,9,11,14,18,22,31))
axis(2,at=seq(-10,20,2), las=1)
x <- dados_trat1$DAA
```

```
par(family = "serif", font.lab = "Times New Roman",font.axis = "Times New
Roman", size=10)
```

```
###lines(DAC,fitted(log), col="red")
curve(coef(ber1)[1]*(1-exp(coef(ber1)[3]*(coef(ber1)[2]-x))/3)^3,
col="blue",lty=1,lwd=2,add=TRUE)
curve(coef(ber1_q1)[1]*(1-exp(coef(ber1_q1)[3]*(coef(ber1_q1)[2]-x))/3)^3,
col="red",lty=1,lwd=2,add=TRUE)
curve(coef(ber1_q2)[1]*(1-exp(coef(ber1_q2)[3]*(coef(ber1_q2)[2]-x))/3)^3,
```

```

col="green",lty=1,lwd=2,add=TRUE)
curve(coef(ber1_q3)[1]*(1-exp(coef(ber1_q3)[3]*(coef(ber1_q3)[2]-x))/3)^3,
col="black",lty=1,lwd=2,add=TRUE)

legend(25,10, legend = c('MQ','Q25','Q50','Q75'), lty=1, lwd=2,
col=c("blue","red",'green','black'),bty = "n", cex=0.8)

#plot(dados_trat1$DAA,dados_trat1$Acumulada, xlab="DAA", ylab="Dados U_P",
pch=19)
#lines(dados_trat1$DAA, fitted(ber1), col="blue", lty=1, lwd=2)
#lines(dados_trat1$DAA, fitted(ber1_q1),col="red", lty=1, lwd=2)
#lines(dados_trat1$DAA, fitted(ber1_q2),col="green", lty=1, lwd=2)
#lines(dados_trat1$DAA, fitted(ber1_q3),col="black", lty=1, lwd=2)
#legend(15,22, legend = c('MinimosQuadrado','Q25','Q50','Q75'), lty=1,
lwd=2, col=c("blue","red",'green','black'),bty = "n")

### CRITÉRIOS DE AVALIAÇÃO DA QUALIDADE DO AJUSTE ###

## COEFICIENTE DE DETERMINAÇÃO

tau=0.25
Rho <- function(u, tau) u * (tau - (u < 0))
a <- sum(Rho(residuals(ber1_q1), tau))
b <- sum((dados_trat1$Acumulada - mean(dados_trat1$Acumulada))^2)
r = 1- (a/b)

tau=0.50
Rho <- function(u, tau) u * (tau - (u < 0))
a <- sum(Rho(residuals(ber1_q2), tau))

```

```

b <- sum((dados_trat1$Acumulada - mean(dados_trat1$Acumulada))^2)
r = 1- (a/b)

tau=0.75
Rho <- function(u, tau) u * (tau - (u < 0))
a <- sum(Rho(residuals(ber1_q3), tau))
b <- sum((dados_trat1$Acumulada - mean(dados_trat1$Acumulada))^2)
r = 1- (a/b)

## QUADRADO MÉDIO DO RESÍDUO (QMR)
n <- length(dados_trat1$Acumulada); n
p <- 3 #(o modelo tem 3 parâmetros)
df <- n-p # graus de liberdade do modelo de regressão

(QMR <- sum((dados_trat1$Acumulada-predict(ber1, dados_trat1$DAA))^2)
/(df))

n <- length(dados_trat1$Acumulada); n
p <- 3 #(o modelo tem 3 parâmetros)
df <- n-p # graus de liberdade do modelo de regressão

(QMR <- sum((dados_trat1$Acumulada-predict(ber1_q1, dados_trat1$DAA))^2)
/(df))

n <- length(dados_trat1$Acumulada); n
p <- 3 #(o modelo tem 3 parâmetros)
df <- n-p # graus de liberdade do modelo de regressão

(QMR <- sum((dados_trat1$Acumulada-predict(ber1_q2, dados_trat1$DAA))^2)

```

```

/(df))

n <- length(dados_trat1$Acumulada); n
p <- 3 #(o modelo tem 3 parâmetros)
df <- n-p # graus de liberdade do modelo de regressão

(QMR <- sum((dados_trat1$Acumulada-predict(ber1_q3, dados_trat1$DAA))^2)
/(df))

## DESVIO MÉDIO ABSOLUTO DO RESÍDUO (DMA)

(DMA <- sum( abs(dados_trat1$Acumulada - predict(ber1, dados_trat1$DAA))
/(length(dados_trat1$Acumulada))))

(DMA <- sum( abs(dados_trat1$Acumulada - predict(ber1_q1, dados_trat1$DAA))
/(length(dados_trat1$Acumulada))))

(DMA <- sum( abs(dados_trat1$Acumulada - predict(ber1_q2, dados_trat1$DAA))
/(length(dados_trat1$Acumulada))))

(DMA <- sum( abs(dados_trat1$Acumulada - predict(ber1_q3, dados_trat1$DAA))
/(length(dados_trat1$Acumulada))))

#++++++#+
# Script do similar para os demais tratamentos.
#++++++#+.

```